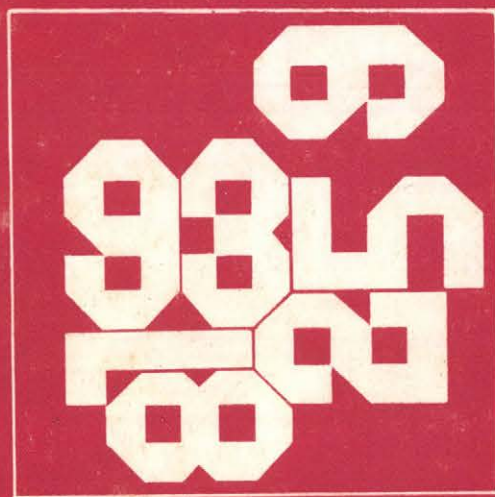


MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutató Intézet Budapest



MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
SZÁMITÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓ INTÉZETE

STIFF TIPUSU KÖZÖNSÉGES DIFFERENCIÁLEGYENLETEK
MEGOLDÁSÁRÓL

Irta:
STREHÓ MÁRIA

Tanulmányok 48/1976.

A kiadásért felel:
DR. VÁMOS TIBOR

ISBN 963 311 018 1

TARTALOMJEGYZÉK

	Oldal
BEVEZETÉS	5
1. STIFF TIPUSU DE-K	8
1.1. Alapfogalmak és problémák	8
1.2. A stiffness	14
2. A STIFF TIPUSU DE-K MEGOLDÁSI MÓDSZEREI	19
2.1. Módosított egylépéses módszerek	20
2.2.1. A lineáris egylépéses módszerek	21
2.2.2. Magasabbrendű módszerek, amelyek nem használják a Jacobi determinánst	23
2.2.3. Egylépéses módszerek amelyek felhasználják az az egyenletrendszer Jacobi mátrixát	25
2.3. Többlépéses módszerek	27
2.3.1. Az A - stabilitásnál gyengébb stabilitási feltételek és ilyen tulajdonságú módszerek	28
2.3.2. Exponenciálisan illesztett többlépéses módszerek	33
2.3.3. Más típusú többlépéses módszerek	34
2.4. Szűrő módszerek	37
2.4.1. Szinguláris perturbációk	37
2.4.2. Egy sima partikuláris megoldás előállítása	39
3. ALKALMAZÁSI TERÜLETEK	41
3.1. Elektromos áramköri és szabályozási problémák	41
3.1.1. Elektromos áramkörök	41
3.1.2. Szabályozási problémák	42
3.2. Kémiai reakciók	43
3.2.1. Reakciók kvázi-stacionárius koncentrációju speciesszekkel	43
3.2.2. Desztillációs folyamatok	45
3.3. Reaktor kinetika	45
3.4. Parciális DE-k	46
3.5. Paraméter becslés	48
3.6. Differenciál-algebrai egyenletrendszerek	49
4. SZÁMITÓGÉPES TAPASZTALATOK	50
4.1. A feladatok	50

4.2. A felhasznált programok	51
4.3. Következtetések	53
1.sz. Melléklet	55
2.sz. Melléklet	57
IRODALOMJEGYZÉK	60

Jelen dolgozat a 9.2-N sz. intézeti
kutatási téma keretében készült.

BEVEZETÉS

A környező világ számos jelenségét differenciálegyenletek /továbbiakban DE-k/ segítségével modellezhetjük. Egy adott modell vizsgálatához szükségünk van általában a DE megoldására is. Ismeretes, hogy az egyenletek nagy része nem oldható meg explicit alakban. A reálisan megoldható feladatok osztálya a közelítő módszerek fejlődésével és az elektronikus számítógépek alkalmazásával bővült ki jelentősen. Ekkor azonban új problémák is keletkeztek, a számítógép sebességének és memóriája befogadóképességének korlátain kívül /amivel itt nem kívánunk foglalkozni/; a közelítő módszer numerikus instabilitása. Ezt a számolás során fellépő kellemetlen jelenséget a közelítés pontatlanságából és a számábrázolás véges voltából /kerekítésből/ eredő hibák felhalmozódása okozza.

A kezdeti érték feladatok esetében, amikor ismerjük a megoldást egy kezdeti időpontban és meg akarjuk azt határozni egy későbbi időpontban, a közelítő módszerektől azt várjuk, hogy a kezdeti értékek kis perturbációja /pontatlansága/ csak kis változást eredményezzen a közelítő megoldásban, azaz a módszer numerikusan stabilis legyen.

A 60-as évek elejére úgy tűnt, hogy a kezdeti érték feladatok numerikus analízise elméletileg teljesen megalapozott és lezárt, további kutatásokat nem igényel.

Ismeretes, hogy a hagyományos közelítő módszerek numerikus stabilitási követelményei a DE megoldásának leggyorsabban változó összetevőjétől függenek.

Az alkalmazás számos területén - a biológiában, kémiai kinetikában, magfizikában, folyadékok dinamikájában, számítógép tervezésben - fordulnak elő olyan DE-k, amelyekben a megoldás egyes összetevői nagyon eltérő változást mutatnak. Az ilyen egyenletek esetén nem célszerű a hagyományos közelítő módszerek alkalmazása, ugyanis a numerikus stabilitáshoz szigorú követelményeknek kell teljesülnie /a lassu összetevők kiszámításakor is a módszer paraméterei a gyorsan változó tagtól fognak függeni/, amelyek a feladat számítógépen való megoldásakor irreálisan megnövelhetik a gépidőt, és még így sem biztosítanak elfogadható

pontosságu megoldást. Minthogy ezt a nehézséget először olyan egyenleteknél figyelték meg, amelyek különböző erősségű /merevségű - angolul stiff/ rugók által vezérelt mozgást végző tömegekre vonatkoztak, ezeket az egyenleteket stiff típusnak nevezték el. A felmerült problémák azt mutatják, hogy korán sem tekinthető befejezett témának a DE-k numerikus kezdeti érték problémájának vizsgálata az 1960-as évekig kidolgozott módszerekkel.

Miért került el addig ez a probléma a figyelmet? Egyrészt talán azért, mert az egyes alkalmazások esetében sikerült többé kevésbé kielégítő egyszerűsítésekkel kikerülni a DE stiffness okozta nehézségeket. Többek tudatában voltak saját problémájuk meg nem nevezett "stiffségének", de nem ismerték fel a probléma általánosságát. Néhány helyen a hagyományos módszereket használták és ez is motiválta igényüket nagyobb és modernebb számítógép vásárlására. /ld. Dahlquist /1973//.

A továbbiakban a stiff típusu egyenletek közelítő megoldásának problémájával pragmatikus szempontból kívánunk foglalkozni. Ennek az az oka, hogy egységes elmélet még nem jött létre, az eredmények újak és nagyszámúak, valamint néhány fontos elméleti probléma még nincs megoldva /például nem találtak elfogadható elégséges feltételeket a stiffnesstól független hibabecslésre/.

A magyar szakirodalomban eddig nem foglalkoztak a stiff típusu egyenletekkel kapcsolatos problémákkal behatóan. Az egyetlen /általán ismert/ munka KovácsaZsolté /1971/, egy konkrét, irodalmból vett módszert ismertet stiff típusu DE-k megoldására és annak számítógépre írt programjának blokkdiagramját közli.

A tanulmányban a következőkkel foglalkozunk:

- a/ a stiffness jelenségének megvilágítása
- b/ módszerek ismertetése
- c/ alkalmazási területek áttekintése
- d/ számítógépes tapasztalatok leírása

A témával kapcsolatos szakirodalom nagyon bőséges, ezért a módszerek ismertetésénél nem törekszünk teljességre. Az alapvető típusok leírásával egyidejűleg bemutatjuk azokat a jellemző tulajdonságokat is, amellyel egy stiff típusu DE-t sikeresen megoldó módszernek rendelkeznie kell.

Köszönetet mondok Vidoczi Tamásnak /KKKI/, akinek kémiai kinetikai problémái inspirálták az elmélet gyakorlatban való kipróbálását. Megköszönöm B.D. Lindberg-nek /Stockholm, Royal Institute of Technology/, hogy rendelkezésemre bocsátotta a stiff típusu egyenletekkel kapcsolatos kutatási eredményeit és módszerének programcsomagját.

1. STIFF TIPUSU DE-K

1.1. Alapfogalmak és problémák

Alábbiakban összefoglaljuk azokat a DE-k kezdeti érték feladatának közelítő megoldásával kapcsolatos problémákat és fogalmakat, amelyekre szükségünk lesz.

Legyen

$$y' = f(x, y) \quad , \quad (1)$$

$$y(x_0) = y_0 \quad , \quad (2)$$

ahol $y(x), y_0 \in \mathbb{R}^m$, $f: I \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $x \in I \subset \mathbb{R}^1$. \mathbb{R}^m az m dimenziós Euklideszi teret jelöli, és $I = [x_0, b]$, x_0 és b valós számok/.

Keressük az (1) elsőrendű közönséges differenciál egyenletrendszernek /továbbiakban KDE/ a (2) kezdeti feltétel által meghatározott $Y(x)$ partikuláris megoldását az $x_0 \leq x \leq b$ intervallumon.

Általában a vektor és skalár mennyiségeket nem különböztetjük meg a jelölésben kivéve azt az esetet, ha ez félreértést okozna.

A későbbiekben mindig feltesszük, hogy teljesülnek a DE megoldásának létezésére és egyértelműségére vonatkozó alábbi tétel feltételei.

Tétel: Ha $f(x, y)$

A/ értelmezve van a $D = \{(x, y) : x_0 \leq x \leq b, y \in \mathbb{R}^m\}$ tartományon és folytonos D -n

B/ valamint y szerint kielégíti a Lipschitz feltételt, azaz

$$\|f(x, y_1) - f(x, y_2)\| < L \|y_1 - y_2\| \quad (3)$$

ha (x, y_1) és $(x, y_2) \in D$; $\| \cdot \|$ a normát jelöli /ld. pl. Collatz 1966 /, L az x, y_1, y_2 értéktől független konstans /az un.

Lipschitz konstans/, akkor létezik az (1), (2) feladatnak egyértelmű megoldása.

A bizonyítás a KDE-k elméletéből ismert, /ld. pl. Pontrjagin (1972)/

A feladat közelítő megoldásánál az a célunk, hogy az $x_1, \dots, x_N = b$ diszkrét ponthalmazon meghatározzuk az $Y(x)$ partikuláris megoldás számértékeit. Az x_n pontok rendszerint ekvidisztans elhelyezések, azaz $x_n = x_0 + nh$, $n=1, 2, \dots, N$; ahol h a lépéshossz. Jelölje az $Y(x_n)$ közelítő értékét y_n .

Az (1), (2) Cauchy probléma megoldására használt klasszikus közelítő módszerek a következő két osztályba sorolhatók /ezekről részletesen ld. Henrici /1962/, Gear/1971/, Lambert /1973/, Varga László /1973/ /.

Egylépéses módszerek, amelyek a számítások során csak az előző pontban kapott megoldásértéket használják. A legfontosabb egylépéses módszerosztály az r -pontos Runge-Kutta /RK/ módszerek:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^r p_i k_i, \quad (4)$$

ahol $k_i = f(x_n + \alpha_i h, y_n + h \sum_{j=1}^r \beta_{ij} k_j)$, $i=1, 2, \dots, r$

$p_i, \alpha_i, \beta_{ij}$ valós konstansok, $p_r \neq 0$.

Ha $\beta_{ij}=0$, amikor $i \geq j$, a módszer explicit; ellenkező esetben implicit.

Többlépéses módszerek, melyek a megoldás értékének egy új pontbeli kiszámításához egynél több pontbeli megoldásérték ismeretét igénylik. Legismertebb osztályuk a lineáris k -lépéses módszer /LKL/:

$$y_{n+1} = \sum_{j=1}^k a_j y_{n+1-j} - h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+1-j} \quad (5)$$

ahol $y_{n+1-j}, f_{n+1-j} = f(x_{n+1-j}, y_{n+1-j})$ ismert értékek, ha $j=1, 2, \dots, k$. α_j, β_j valós konstansok, $|\alpha_k| + |\beta_k| \neq 0$.

A $\beta_0=0$ esetben explicit /prediktor/ típusú, ellenkező esetben implicit /korrektor/ típusú a módszer.

A módszer lokális képlethibája egy adott x_{n+1} pontban az

$y_{n+1} - Y(x; x_n, y_n)$ különbség, ahol $Y(x; x_n, y_n)$ az (x_n, y_n) ponton átmenő pontos megoldás. /Rendszerint egy adott közelítő módszer hibája a h /lépéshossz/ paramétertől függ. Ha a közelítő megoldás egy rögzített $x=x_n$ pontban h szerint Taylor-sorba fejthető, akkor:

$$y_n = y(x, h) = y(x) + \sum_{i=1}^q C_i(x) h^i + O(h^{q+1}) \quad (6)$$

A módszer globális hibája egy adott x_n pontban a közelítő és pontos megoldás különbsége, azaz $y_n - y(x_n)$.

A módszer rendje

Ha a módszer maximálisan q -ad fokú polinomra pontos, akkor q -ad rendű /azaz ha a (6) Taylor-sorban a $C_i=0$, amikor $i=1, \dots, q$, és $C_{q+1} \neq 0$ /.

A magasabb rendű módszerek nagyobb pontosságot garantálnak, ha a h lépéshossz elég kicsiny.

Az alacsonyabb rendű módszerek pontossága az extrapolációs eljárások segítségével növelhető.

Extrapolációs eljárás, amely a h paraméter különböző értékeire kombinálja az azonos közelítéssel kiszámított numerikus megoldásokat, hogy a (6) sorfejtésből minél több c_1, \dots, c_q együtthatót tüntessen el.

A módszerek konvergenciája

Az egylépéses módszer konvergens, ha tetszőleges y_0 kezdeti értékre és $x \in [x_0, b]$ értékre teljesül, hogy

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ (n \rightarrow \infty)}} y_n = y(x) \quad ; \quad \text{ahol} \quad h = (x - x_0)/n \\ x_n = x$$

LKL módszerekre fenti összefüggésen kívül teljesülnie kell minden $y_j = y_j(h)$; $j=0,1,\dots,k-1$ kezdő értékre, hogy $\lim_{h \rightarrow 0} y_j(h) = y_0$.

A kezdeti érték problémák esetében általában egyszerű feladat a DE-re ésszerű közelítő módszert felírni. A probléma csak az, hogy a számolást úgy végezzük el, hogy a közelítés pontatlanságából és a kerekítésekből eredő hibák eközben ne halmozódjanak fel. Ez igazán csak az elektronikus számítógépek alkalmazásával vált komoly problémává, amikor lehetőség nyílt a DE-ket nagy intervallumokon megoldani.

Az alábbiakban definiáljuk a numerikus stabilitás fogalmát a fenti probléma könnyebb tárgyalása érdekében. A KDE-t megoldó közelítő módszerek stabilitásának több fajtája létezik, általában nehéz megmondanunk, hogy melyikre van éppen szükségünk. Bonyolult kérdés a módszerre jellemző stabilitási tulajdonságot kiválasztani, ennek részleteiben nem mélyedünk el. Gear /1971/ megfogalmazását használjuk a továbbiakban.

A KDE-t megoldó numerikus módszer stabilitása

Ha minden differenciál egyenletre létezik olyan $h_0 > 0$ lépéshossz, hogy a kezdeti értékekben okozott rögzített nagyságú változás minden $0 \leq h \leq h_0$ lépéshossz mellett korlátos változást okoz a numerikus megoldásban, akkor a módszer stabilis /nem azonos az egyenlet stabilitásával!/.

A definíció a $h \rightarrow 0$ határ átmenettel kapcsolatos. A valóságban azonban véges számú lépéssel kell számolnunk, ezért a hiba nagysága a nemzérus h értékek esetében érdekel bennünket, nevezetesen az, hogy a lépésenként elkövetett hibáknak /lokális képlethiba és kerekítési hiba/ mekkora a hatása a megoldásra rögzített h lépéshossz mellett.

Abszolút stabilis módszer

Egy adott h lépéshosszra és adott KDE-re egy módszer abszolút stabilis, ha az y_n közelítő megoldás kiszámításakor δ^n hibát elkövetve a további y_i ($i > n$) értékekben okozott hiba δ^n -nál nem lesz nagyobb.

Mint hogy ez a meghatározás a megoldandó feladattól erősen függ, ezért szokás bevezetni az ún. tesztegyenleteket:

$$y'(x) = \lambda y(x) \quad , \quad y(x_0) = y_0 \quad (7)$$

ahol λ komplex konstans /gyakran $x_0=0$, $y_0=1$ /,

Megjegyezzük, hogy

1. az $y' = Ay$ lineáris egyenletrendszer, ahol A $m \times m$ -es mátrix, visszavezethető tesztegyenletekből álló rendszerre abban az esetben, ha az A mátrix diagonális alakra hozható. Ha az $SAS^{-1} = \Lambda$ az A mátrix olyan hasonlósági transzformációja, mellyel az a Λ_i diagonális elemekkel rendelkező Λ diagonális mátrix alakra hozható, akkor legyen: $z = Sy$. Kapjuk, hogy $S^{-1}z' = AS^{-1}z$ vagy $z' = SAS^{-1}z = \Lambda z$. Ez egy egymástól független, $z'_i = \lambda_i z_i$ alakú egyenletekből álló egyenletrendszer.

2. az általános nemlineáris egyenletekre az A mátrix szerepét a rendszer variációs egyenletének mátrixa játssza, azaz a $\partial f / \partial y$ Jacobi mátrix.

A gyakorlatban a módszereket általában a tesztegyenleten próbálják ki és hasonlítják össze egymással /ld. bővebben ~~kapcsolat~~ (1973)/.

Egy módszer abszolút stabilitási tartománya, H azon valós, nem negatív h és komplex λ értékek halmaza, amelyek mellett az adott módszert konstans h lépéshossz esetén alkalmazva az $y' = \lambda y$, $y(x_0) = y_0$ egyenlet megoldására, zérushoz tartó y_n sorozatot kapunk, ha $n \rightarrow \infty$; azaz $H = \{h\lambda : h > 0, \lambda \in \mathbb{C}, y_n \rightarrow 0, \text{ amikor } n \rightarrow \infty\}$. A továbbiakban stabilitás alatt általában abszolút stabilitást értünk. Illusztráljuk az elmondottakat egy DE-en.

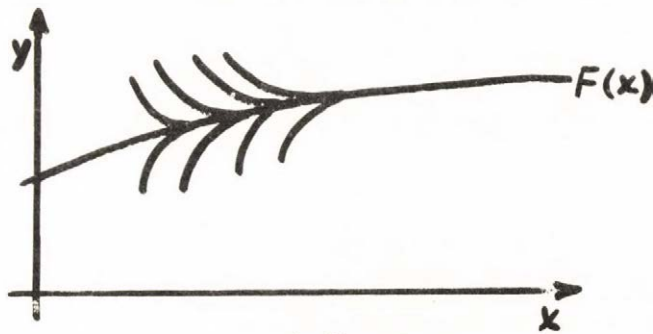
Legyen az integrálandó differenciálegyenlet a következő:

$$y'(x) = \lambda(y(x) - F(x)) + F'(x) \quad , \quad \text{ahol} \quad \lambda < 0 \quad . \quad (8)$$

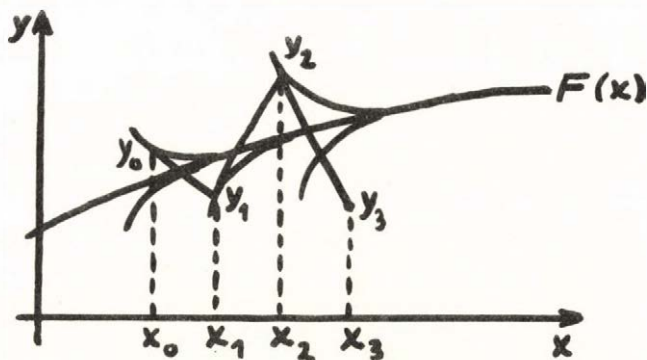
Ennek megoldása az

$$y(x) = c e^{\lambda x} + F(x)$$

egy paraméteres görbesereg. /ld. 1. ábrán/



1. ábra



2. ábra

Keressük valamely $y(x_0) = y_0$ kezdeti feltétel mellett (8) megoldását. Rögzített h lépéshossz esetén alkalmazzuk az explicit Euler módszert

$$y_{n+1} = y_n + h y'_n = y_n + h f(x_n, y_n) \quad (9)$$

Ha h nem elég kicsiny, akkor a 2. ábrán illusztrált instabilitási jelenség következik be. Az egyszerűség kedvéért legyen $F(x) \equiv 0$. Ekkor az Euler módszerrel kapjuk, hogy

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) = (1+h\lambda)y_n$$

Ebből látható, hogy $y_n \rightarrow 0$ monoton, amikor $x_n \rightarrow \infty$, ha $|1+h\lambda| < 1$, azaz $|h\lambda| < 2$. A módszer tehát csak akkor lesz stabilis, ha $|h| < 2/|\lambda|$. A (4), (5) hagyományos módszerek stabilitásához is az szükséges, hogy a h lépéshossz $1/|\lambda|$ nagyságrendű legyen.

1.2. A stiffness

Ha a KDE partikuláris megoldásának összetevői nagyon eltérő nagyságu változást mutatnak, akkor a h lépéshosszt nem tudjuk kielégítő módon megválasztani a módszer stabilitásának feltételéből, és ez problémákat okoz. Megjegyezzük, hogy a megoldás gyorsan illetve lassan változó összetevői durván a DE Jacobi mátrixának nagy illetve kis abszolútértékű sajátértékeinek felelnek meg. /Ez azonban nem teljesen így van, különösen nem, ha a Jacobi mátrix sajátvektor rendszere gyorsan változik./

Vizsgáljuk meg a következő feladatot: /Lambert 1973/

$$y' = Ay, \quad y(0) = (1, 0, -1)^T,$$

ahol

$$A = \begin{pmatrix} -21 & 19 & -20 \\ 19 & -21 & 20 \\ 40 & -40 & -40 \end{pmatrix} \quad (10)$$

és T a vektor transzponáltja.

A feladat elméleti megoldása:

$$u(x) = \frac{1}{2} e^{-2x} + \frac{1}{2} e^{-40x} (\cos 40x + \sin 40x),$$

$$v(x) = \frac{1}{2} e^{-2x} - \frac{1}{2} e^{-40x} (\cos 40x + \sin 40x),$$

$$w(x) = -e^{-40x}(\cos 40x - \sin 40x),$$

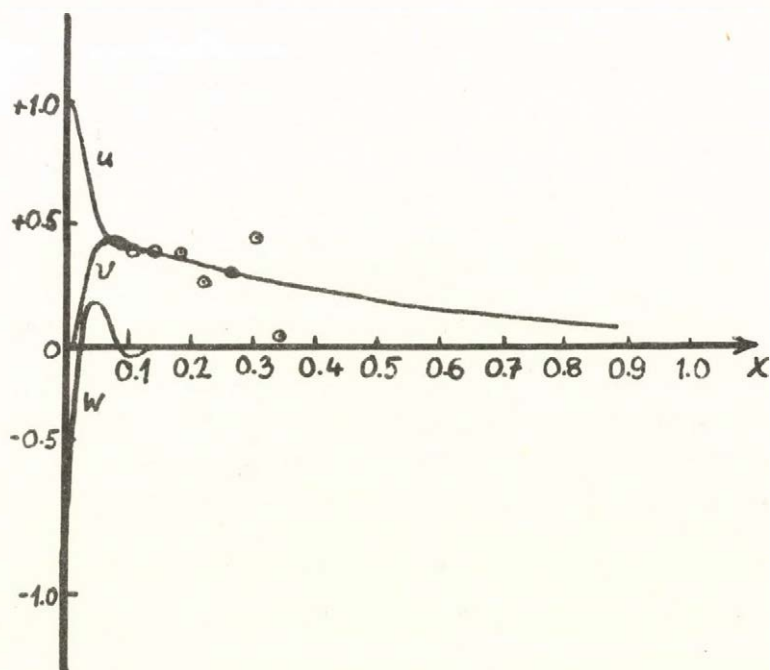
ahol

$$y(x) = (u(x), v(x), w(x))^T.$$

A 3. ábrán folytonos vonallal berajzoltuk az $u(x)$, $v(x)$ és $w(x)$ grafikonját.

A $0 \leq x < 0.1$ szakaszon mindhárom összetevő gyorsan változik és természetes, hogy ezt numerikusan csak elég kis lépésköz használatával tudjuk követni. Az $x \geq 0.1$ értékekre viszont azt láthatjuk, hogy u és v gyakorlatilag egyformán és lassan változik, míg a harmadik összetevő, w lényegében nulla. Azt reméljük, hogy ilyen tartományon már nagyobb lépésközzel integrálhatunk. Kísérreljük meg numerikusan megoldani az egyenletrendszert a (9) Euler módszerrel a $0.1 \leq x \leq 1.0$ tartományon 0.04 lépéshosszal. Adjuk meg $y(0.1)$ értékét kezdeti feltételként az elméleti megoldásból kiszámítva.

Az u komponens hat pontban kiszámított értékét kis karikákkal jelöljük be a 3. ábrán. Látható, hogy ezek teljesen elfogadhatatlan értékek, erősen eltérnek az u pontos megoldástól.



3. ábra

De az

$$y' = Ay, \quad y(0,1) = \left(\frac{1}{2} e^{-0.2}, \frac{1}{2} e^{-0.2}, 0 \right)^T$$

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

egyenletrendszer, amelynek elméleti megoldása

$$y(x) = \left(\frac{1}{2} e^{-2x}, \frac{1}{2} e^{-2x}, 0 \right)^T \text{ a } 0.1 \leq x \leq 1.0$$

szakaszon virtuálisan megkülönböztethetetlen a (10) egyenletrendszer megoldástól, a (9) Euler módszerrel 0.04 lépéshosszal teljesen kielégítően integrálható.

Az ábrán a bekarikázott pontok elhelyezkedése sugallja azt a gondolatot, hogy a (10) feladatra a $0.1 \leq x \leq 1.0$ szakaszon a $h=0.04$ lépéshossz választása okozza azt, hogy kívül kerülünk az abszolút stabilitási tartományon. Klasszikus módszerek stabilitási feltétele $|\lambda_1 h| \leq C$, ahol $|\lambda_1|$ a Jacobi mátrix legnagyobb abszolútértékű sajátértéke. Az Euler módszer esetén $C=2$, mint azt korábban láttuk, azaz az abszolút stabilitási tartomány egy egység sugarú kör, amelynek középpontja a $(-1,0)$ pont. A (10) feladat Jacobi mátrixa éppen az A mátrix, amelynek sajátértékei $-2, -40 \pm 40i$. Így ahhoz, hogy benne maradjunk az abszolút stabilitási tartományban, szükséges, hogy $h < 0.025$ legyen. Érdekes felfigyelni arra, hogy a h -ra tett szigorú megkötésért éppen a $-40 \pm 40i$ sajátértékek felelősek, és ezekhez tartoznak az elméleti megoldásnak a $0.1 \leq x \leq 1.0$ szakaszon elhanyagolható komponensei. Másrészt a (11) feladat Jacobi mátrixának sajátértékei $-2, -2, 0$; így az abszolút stabilitáshoz $h < 1.0$ feltétel kell csak, hogy teljesüljön.

/Negyedrendű Runge-Kutta módszer esetén sem sokkal jobb a helyzet, $h < 0.05$ kellett volna, hogy fennálljon a (10) egyenletrendszerre./

Másként: az A mátrix erősen különböző sajátértékei miatt az u, v, w megoldás függvényék abszolútértékei és differenciál hányadosai

/azaz változásuk/ is nagyon eltérnek. Ezek az eltérések durván exponenciálisan növekednek, ha $x \rightarrow \infty$. Jelen esetben az $x \approx 0.2$ környezetében w és w' értéke már sok nagyságrenddel kisebb, mint u és v abszolút értéke. Ezért amikor $w'(x)$ -et a nála jóval nagyobb u és v függvények algebrai összegeként állítjuk elő, szükségképpen igen nagy pontatlansággal kell számolnunk.

Ismert, hogy az $m \times m$ -es lineáris rendszer

$$y' = Ay + \Phi(x) \quad (12)$$

ahol az A mátrix λ_j sajátértékei és c_j sajátvektorai különbözőek, $j=1,2,\dots,m$, általános megoldásának alakja /Pontrjagin /1972/ /

$$y(x) = \sum_{j=1}^m k_j e^{\lambda_j x} c_j + \Psi(x).$$

Legyen $\operatorname{Re} \lambda_j < 0$, $j=1,2,\dots,m$. Akkor

$$\sum_{j=1}^m k_j e^{\lambda_j x} c_j \rightarrow 0, \quad \text{amikor } x \rightarrow \infty;$$

Ezért a megoldásnak ezt az összetevőjét tranziens /átmeneti/ megoldásnak nevezzük, a $\Psi(x)$ tagot pedig "sima, lassan változó" komponensnek hívjuk. Általában az alkalmazási feladatokban a $\Psi(x)$ "sima" komponens közelítő értéke érdekel bennünket. Ekkor (12) közelítő megoldását addig kell követnünk, amíg a tranziens megoldás leglassabban csökkenő tagja elhanyagolhatóvá válik. Az A mátrix olyan sajátértékei miatt, amelyek a $h\lambda$ komplex sík baloldali félsíkjában messze helyezkednek el, végtelenen kicsiny h lépéshosszt kell használnunk az egész intervallumban, hogy benne maradjunk a kiválasztott módszer abszolút stabilitási tartományában /kivéve, ha ez egy végtelen tartomány, amely magában foglalja az egész baloldali félsíkot/.

Igy a gyakorlatban az történik, hogy bár elvben ez a DE is megoldható lenne a klasszikus módszerekkel, irreálisan megnő a számítógépen való számoláskor a futási idő, valamint a teljes integrálási intervallumon a túlságosan kicsiny h lépéshossz miatt a kerekítési hibák katasztrofálisan felhalmozódhatnak, és elnyelhetik a megoldást. A fellépő nehézség mértékét a legnagyobb $|\operatorname{Re} \lambda|$ abszolútérték nagyságával lehetne jellemezni.

Vezessük be a következő heurisztikus, általában elterjedt definíciót /Lambert (1973)/.

Az $y' = Ay + \Phi(x)$, $y(x_0) = y_0$ lineáris egyenletrendszer, ahol $y(x) \in \mathbb{R}^m$, A $m \times m$ -es valós mátrix, melynek λ_j sajátértékei különbözők - stiff-nek nevezik, ha

$$(a) \quad \operatorname{Re} \lambda_j < 0, \text{ ahol } j=1, 2, \dots, m$$

$$(b) \quad \max_{j=1, 2, \dots, m} |\operatorname{Re} \lambda_j| \gg \min_{j=1, 2, \dots, m} |\operatorname{Re} \lambda_j|.$$

Általános esetben az A mátrixnak a DE variációs egyenletének mátrixa, a $\partial f / \partial y$ Jacobi mátrix, felel meg.

Igy az $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ nemlineáris egyenletrendszer stiff tulajdonsága, ha a rendszer $\partial f / \partial y$ Jacobi mátrixának sajátértékei az (a), (b) feltételek szerint viselkednek. A sajátértékek itt már nem konstansok, hanem a megoldástól függenek, és x -szel együtt változnak, ezért a fenti feltételeket mindig diszkrét x pontokban vizsgáljuk.

Megjegyezzük, hogyha a $\partial f / \partial y$ Jacobi mátrixban szereplő parciális deriváltak folytonosak és korlátosak a D tartományon, ahol

$D = \{ (x, y) : x_0 \leq x \leq b; y \in \mathbb{R}^m, b : \text{valós szám} \}$, akkor az (1) rendszer Lipschitz konstansa:

$$L = \sup_{y \in D} \|\partial f / \partial y\|^{(1)}.$$

(1) Nemlineáris egyenletekre a legnagyobb sajátérték (spektrálsugár) helyett pl. a mátrix logaritmikus normáját használják Dahlquist (1958).

$$\mu(A) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\|E + \epsilon A\| - 1}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln \|e^{\epsilon A}\|}{\epsilon}; \text{ ahol } E \text{ az egység mátrix.}$$

Tetszőleges konstans elemekből álló A mátrixra $\|A\| \geq \max_{j=1,2,\dots,m} |\lambda_j|$;

ahol a λ_j -k az A mátrix sajátértékei. Ha $\max_{j=1,2,\dots,m} |\operatorname{Re} \lambda_j| \gg 0$,
ebből következik, hogy $L \gg 0$.

Ezért a stiff típusu DE-ket az irodalomban szokásos nagy Lipschitz konstansu rendszerként is említeni:

Más közelítésben a stiff DE-k azok, amelyek időkonstansai nagyon eltérőek. Az időkonstanssal jellemezhető a megoldás csökkenésének aránya. Például az $y' = \lambda y$ tesztegyszerűség megoldása $ce^{\lambda t}$.
Ha $\lambda < 0$, akkor az $y e^{-1}$ -szerezése csökken $-1/\lambda$ idő alatt, ez az időkonstans. Egyenletrendszer esetén a különböző összetevők különböző arányban csökkennek. Lokálisan a $\partial f / \partial y$ Jacobi mátrix sajátértékei képviselik ezt a csökkenési arányt; azaz e sajátértékek reciprokai lesznek az időkonstansok.

A stiff típusu egyenletek megoldására gyakran implicit módszert használnak, ez újabb nehézséget okoz. A szokásos, egyszerű iterációs módszert stiff egyenletek esetében nem célszerű alkalmazni, mert a megoldás konvergenciájának szükséges és elégséges feltétele ($|Lh| < C$, ahol L a rendszer Lipschitz konstansa /ld./3//, h a lépéshossz, C valós konstans) ugyanolyan vagy még szigorúbb feltételeket ró a lépéshosszra, mint a stabilitási követelmény /mivel ekkor a fentiek miatt $L \gg 0$ /.

2. A STIFF TIPUSU DE-K MEGOLDÁSI MÓDSZEREI

Az 1.2 szakaszban láttuk, hogy a stiff típusu DE-k közelítő megoldásakor a problémát az okozza, hogy szigorú feltételeket kell kielégítenünk ahhoz, hogy a módszer numerikusan stabilis legyen és implicit módszer esetén a nemlineáris egyenlet iterációs megoldása konvergáljon.

A stiff típusú DE-k megoldásához a fenti problémák kiküszöbölésére új módszert kell keresnünk, új stabilitási fogalmakat kell bevezetnünk, amelyek nem korlátozzák a lépéshosszt az 1.2. szakaszban leírt módon; vagy a hagyományos módszereket kell alkalmasan módosítanunk. A nemlineáris egyenlet megoldására is a szokásos egyszerű iterációs eljárástól eltérő módszereket kell találnunk.

2.1. A-stabilitás

Az 1.2. szakaszban leírtakból nyilvánvaló, hogy a stiff módszerekkel szemben támasztott elég természetes követelmény, hogy a módszer tetszőlegesen nagy λ és elfogadhatóan nagy h lépéshossz mellett stabilis legyen / λ a skaláris tesztegyszerűben az y tag együtthatója/.

Dahlquist /1963/ a fenti követelményt általánosítva, bevezette az alábbi definíciót:

Egy KDE-t megoldó közelítő módszer A-stabilis, ha abszolút stabilitási tartománya tartalmazza a nyílt baloldali félsíkok, azaz $H_A = \{h\lambda : h > 0, \operatorname{Re} \lambda < 0\} \subseteq H$.

Másként: ha a módszert alkalmazzuk az $y' = \lambda y$, $y(x_0) = y_0$ tesztegyszerűre, akkor $y_n \rightarrow 0$, amikor $n \rightarrow \infty$ és $x_n \rightarrow \infty$, tetszőlegesen rögzített, valós $h > 0$ és negatív valós résszel rendelkező, $\operatorname{Re} \lambda < 0$ érték mellett. Létezik-e ilyen módszer?

Ha az Euler módszerben a számítási intervallum végpontjához tartozó érintőt használjuk, akkor A-stabilis módszer kapunk.

Ekkor

1. algoritmus

$$y_{n+1} = y_n + hy'_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \quad (13)$$

ezt a tesztegyszerűre alkalmazva kapjuk, hogy

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1},$$

azaz

$$y_{n+1} = \frac{1}{1-h\lambda} y_n.$$

$|1/(1-h\lambda)| < 1$ minden $h > 0$, $\operatorname{Re} \lambda < 0$ mellett, ezért $y_n \rightarrow 0$, amikor $n \rightarrow \infty$, $x_n \rightarrow \infty$, vagyis a módszer A-stabilis.

Az A-stabilitás nagyon szigorú követelmény, amit Dahlquist alábbi tétele is mutat:

- a/ Nem létezik A-stabilis explicit lineáris többlelépéses módszer /LTL/, valamint
- b/ egy A-stabilis implicit LTL módszer maximálisan másodrendű lehet és
- c/ a másodrendű módszerek közül legkisebb a trapéz formula képlet-hibájának hibakonstansa:

2. algoritmus

$$y_{n+1} = y_n + h/2 \left[(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})) \right] \quad (14)$$

Egy eljárás A-stabilitása kizárja ugyan azt a lehetőséget, hogy a megoldásban jelenlevő nagy sajátértékekhez ($|\operatorname{Re} \lambda| \gg 1$) tartozó tagok instabilissá tegyék az integrálást, de önmagában pontosságot nem garantál. A kívánt pontosság eléréséhez szükséges, hogy a h lépéshossz a lépésenként becsült hibához igazodjon. A pontosság például extrapolációs eljárással növelhető. Minthogy a magasabbrendű módszerek nagyobb pontosságot adnak, kíváncsú az ilyen módszerek használata. Ezek konstruálásához vagy az A-stabilitás feltételén kell enyhíteni /A(α)-stabilitás, stiff stabilitás stb./ vagy nem a hagyományos LTL módszerek közül kell választanunk.

A továbbiakban bemutatunk néhány A-stabilis módszert az (1), (2) feladat megoldására stiff esetben.

2.2. Módosított egylépéses módszerek

2.2.1. A lineáris egylépéses módszerek

A lineáris egylépéses módszer az un. \ominus módszer változata:

3. algoritmus

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\left[(1-\Theta) f_{n+1} + \Theta f_n \right] \right) \quad (15)$$

A $0 \leq \Theta < 1$ esetben a módszerek impliciték, így minden integrálási lépésnél egy nemlineáris egyenletrendszert kell megoldani. A módszer rendje $q=1$, ha $\Theta \neq 1/2$ és $q=2$, amikor $\Theta=1/2$ /ez a trapézformula/.

A tesztegyenletre a Θ módszerrel kapjuk, hogy

$$y_{n+1} = \frac{1 + \Theta \lambda h}{1 - (1-\Theta) \lambda h} y_n$$

$$\text{Igy } r = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{y_{n+1}}{y_n} = \frac{\Theta}{1-\Theta} < 1$$

csak akkor, ha $0 \leq \Theta \leq 1/2$.

Ebben az esetben $y_n \rightarrow 0$ és a módszer A-stabilis is, ahogyan ezt Liniger-Willoughby /1970/ megmutatta. Θ meghatározására is adnak módszer, ha a $\partial f / \partial y$ Jacobi mátrix sajátértékei közelítőleg ismertek.

Ha a $\partial f / \partial y$ mátrix sajátértékeiről semmit nem tudunk, akkor Liniger /1969/ a $\Theta = 0.122$ választást javasolja, minthogy ekkor az alábbi mennyiség minimumát éri el:

$$\max_{-\infty < q < 0} \left| e^q - \frac{1 + \Theta q}{1 - (1-\Theta) q} \right|, \quad \text{ahol } q = \lambda h.$$

A trapéz formulát, mint azt 2.1.-ben láttuk Dahlquist /1963/ vizsgálta.

A trapézformulára $r=-1$, így a nagy negatív valós résszel rendelkező sajátértékekre korlátos, de nagyon lassan csökkenő megoldást kapunk.

Megjegyezzük, hogy a stiff egyenletek esetében a trapéz formula lassan csökkenő, oszcilláló hibát okoz. Ezeket a hibákat Lindberg (1969) simító eljárásával csillapíthatjuk.

Ha y_{k-1} , y_k és y_{k+1} ismert értékek, akkor legyen

$$\hat{y}_k = (y_{k-1} + 2y_k + y_{k+1}) / 4$$

és a további számításokhoz használjuk fel y_k -t, mint a $x=x_k$ pontban vett kezdő értéket. A (7) tesztegyenletre egyszer alkalmazva a fenti simitást az oszcilláló hibát $(1 - (h\lambda/2)^2)^{-1}$ tényezővel csillapítja. Így a simitás a nagy $|h\lambda|$ értékek esetén hatékonyabb. A simító eljárás többször egymásután is alkalmazható.

2.2.2. Magasabbrendű módszerek, melyek nem használják a Jacobi determinánst

Ehle /1968/ megmutatta, hogy az 1-pontos 2l-ed rendű, implicit RK módszerek (4. algoritmus), amelyek Butcher /1964/ konstruált, A-stabilisak. A módszert az $y' = \lambda y$, $y(0) = 1$ tesztegyenletre alkalmazva kapjuk, hogy

$$y_{n+1} = \frac{P_i(\lambda h)}{Q_i(\lambda h)} y_n,$$

ahol $P_i(x)$ és $Q_i(x)$ az x -nek 1-ed fokú polinomjai. Minthogy a módszer 2l-ed rendű:

$$R_{11}(h\lambda) = \frac{P_1(h\lambda)}{Q_1(h\lambda)} = e^{h\lambda} + O(h^{2l+1}).$$

Így $R_{11}(x)$ az e^x függvény 1-edik diagonális Pade-féle közelítése. Ismert, hogy az ilyen típusú közelítések a következő tulajdonsággal rendelkeznek /Birhoff and Varga /1965//:

$|R_{11}(x)| < 1$, ha $\text{Re}(x) < 0$, $l=0,1,2,\dots$. Ekkor $y_n \rightarrow 0$, amikor $x_n \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$, tetszőleges, rögzített valós $h > 0$ és negatív valós résszel rendelkező λ -ra; azaz az ilyen implicit RK módszerek A-stabilisak.

A Taylor-sor módszer kiterjesztésével is kaphatunk A-stabilis módszert. Ha az f függvény deriváltjai az x_n és x_{n+1} pontban kiszámíthatók, akkor tekinthetjük a következő formulát:

5. algoritmus

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^1 h^m (\beta_{mj1} y_n^{(j)} + \beta_{mjo} y_{n+1}^{(j)}) \quad (16)$$

ahol β_{mjo} és β_{mj1} adott konstansok.

Ezt a teszt egyenletünkre alkalmazva kapjuk, hogy

$$y_{n+1} = \frac{1 + \sum_{j=1}^1 \beta_{mj1} (h\lambda)^j}{1 - \sum_{j=1}^1 \beta_{mjo} (h\lambda)^j} y_n = R_{11} (h\lambda) y_n.$$

E módszer is éppen 21-ed rendű. $R_{11}(h\lambda)$ ismét $e^{h\lambda}$ Padé-féle közelítése, így a fentiek alapján a módszer A-stabilis.

Megemlítjük, hogy több szerző vizsgált olyan A-stabilis implicit RK módszereket, amelyeket különböző típusu kvadratura formulával állított elő. Watts és Shampine /1973/ ún. r-blokk implicit egylépéses módszereket konstruált. A módszer minden egyes alkalmazásakor a megoldás r új pontban számítható ki egyidejűleg.

Legyen $n=kr$ és $k=0,1,\dots$ valamint $x_{n+r}=x_0 + (k+1)rh \leq b$.

A módszer általános alakja:

6. algoritmus

$$\bar{y}_k = \bar{e} y_n + h \bar{d} f_n + h B F(\bar{y}_{nk}) ; \quad (17)$$

ahol $B = \{b_{ij}\}$, $\bar{e} = (1, 1, \dots, 1)^T$, $\bar{d} = (d_1, d_2, \dots, d_r)^T$, adott értékek,

$$\bar{y}_k = (y_{n+1}, \dots, y_{n+r})^T, \quad F(\bar{y}_k) = (f_{n+1}, \dots, f_{n+r})^T.$$

(17) nemlineáris egyenletrendszer a megoldás új értékeire.

A (17) módszerek egy A-stabilis alosztálya állítható elő Newton-Cotes típusú kvadraturák segítségével az $r \leq 8$ esetben, az $r=9,10$ esetben a formulák nem A-stabilisak. A fenti szerzők módszere alkalmas tetszőlegesen magasrendű A-stabilis blokk módszer előállítására, ezt konstruktív módon bizonyítják be.

2.2.3. Egylépéses módszerek, melyek felhasználják az egyenletrendszer Jacobi mátrixát

A rendszer Jacobi mátrixa a RK módszerek együttthatóiban explicit módon is szerepelhet. Rosenbrock /1963/ az explicit RK módszerek következő módosítását definiálta

7. algoritmus /Rosenbrock/

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + h \sum_{i=1}^r p_i k_i \\
 k_1 &= f(y_n) + b_1 A(y_n) k_1 \\
 k_q &= f\left(y_n + h \sum_{i=1}^{q-1} \beta_{qi} k_i\right) + b_q h k_q A\left(y_n + h \sum_{s=1}^{q-1} \gamma_{qs} k_s\right) \\
 q &= 2, 3, \dots, r
 \end{aligned} \tag{18}$$

ahol $A(y) = \{\partial f / \partial y\}$, és a DE $y' = f(y)$ alakú. Az (1), (2) rendszer felírható ilyen alakban, ha a dimenziót eggyel megnöveljük az $y'_0 = 1$, $y_0(x_0) = x_0$ egyenlet hozzáadásával. Az egy és 2-pontos, első illetve másodrendű módszerekről könnyű belátni, hogy A-stabilissé válnak az együttthatók megfelelő megválasztásával. Az r-pontos eljárás esetén r darab lineáris egyenletet kell megoldanunk, és ezeknek az egyenleteknek a felírásában, r egymásutáni pontban ki kell számítanunk a Jacobi determinánst.

Pl. a fenti osztályba tartozó A-stabilis 2-pontos harmadrendű módszer együtthatói a következők:

$$\begin{aligned}p_1 &= -0.41315432, & p_2 &= 1.41315432, \\b_1 &= 1.40874829, & b_2 &= 0.59175171, \\ \beta_{21} = \gamma_{21} &= 0.17378667.\end{aligned}$$

Haines /1969/ konstruált a fentihez hasonló módszert beépített hibabecsléssel.

Liniger és Willoughby /1970/ egy A-stabilis módszer osztályt definiált a következőképp:

8. algoritmus

$$\begin{aligned}y_{n+1} - y_n &= \frac{h}{2} \left[(1+a)f_{n+1} + (1-a)f_n \right] + \\ &+ \frac{h^2}{4} \left[(b+a) A(y_{n+1}) - (b-a) A(y_n) \right]\end{aligned}\quad (19)$$

ahol $A(y) = \{ \partial f / \partial y \}$, az a és b paraméterekre pedig teljesül, hogy

$$1/3 \leq a+b \leq 2, \quad 0 \leq b-a \leq 1/3.$$

Minthogy a módszerek impliciték, minden lépésben egy nemlineáris egyenletrendszerrel kell megoldanunk. A fenti szerzők erre a célra a Newton-módszernek egy olyan változatát ajánlják, ahol a $h^2 \partial / \partial y \{ \partial f / \partial y \}$ tagot nem veszik figyelembe az egyenlet megoldásakor. A módszernek a munkaigénye ugyanolyan nagyságrendű, mint a θ -módszeré. Kimutatható, hogy a és b megválasztható úgy, hogy két különböző sajátértékhez tartozó megoldás pontosan legyen reprezentálva /ld. 2.3.2./. A módszerek másodrendűek, ha $b \neq 1/3$, harmadrendűek a $b=1/3$ és az $a \neq 0$ esetben és negyedrendűek, amikor $b=1/3$, $a=0$. A negyedrendű módszerre a globális hiba a h lépéshossz csak páros hatványu tagjait tartalmazó aszimptotikus sorba fejthető,

de ez a módszer rosszul reprezentálja a nagy negatív sajátértékeket. Itt $y_{n+1} = r(\lambda h) \cdot y_n$ és $\lim_{|\lambda h| \rightarrow \infty} r(\lambda h) = 0$.

Megjegyzés

Az általános alakú DE-k megoldásakor a szükséges munka mennyisége nagyon gyorsan nő a felhasznált magasabbrendű deriváltak számának függvényében. Az $y(x)$ második deriváltjának használata ésszerűnek látszik akkor, ha ezt a mennyiséget /legalább közeli-tőleg/ ki kell számítani minden integrálási lépésben a keletkezett nemlineáris egyenletrendszer megoldására. Erősen kétséges, hogy $y(x)$ harmadik deriváltjának lépésenkénti kiszámítását ellensúlyozza-e az a lehetőség, hogy nagyobb lépéshosszal integrálhatunk a pontosság megőrzése mellett.

2.3. Többlépéses módszerek

A 2.1. szakaszban láttuk, hogy az A-stabilis konstans együtthatós LTL módszerek osztálya nagyon kicsi, ezért vagy gyengébb stabilitási tulajdonsággal rendelkező módszereket kell vizsgálnunk, vagy a többlépéses módszereknek egy más osztályát.

A stiff típusú DE-k megoldására használható többlépéses módszerek gyakran implicitek, ezért lépésenként általában egy nemlineáris egyenletrendszer megoldására van szükség. Ez az 1.2. szakasz megjegyzésében látott okok miatt nem oldható meg egyszerű iterálással, rendszerint Newton-típusú iterációs formulát kell használni. Ehhez a rendszer Jacobi determinánsát, illetve annak közelítő értékét kell kiszámítani. Nagy rendszerek esetén a Jacobi mátrix sparsitását /ritkaságát/ szokták kihasználni. A számítások csökkentése céljából a Jacobi mátrixot szakaszosan konstansnak tekintik /y szerint/ és csak akkor számolják újra a mátrix elemeit, ha a Newton-eljárás nem konvergál.

2.3.1. Az A-stabilitásnál gyengébb stabilitási feltételek

Widlund /1967/ bevezette az $A(\alpha)$ -stabilitás fogalmát: egy DE-t megoldó numerikus módszer $A(\alpha)$ -stabilis, ha az $y' = \lambda y$, $(y(x_0) = y_0)$ egyenletre az összes numerikus közelítések zérushoz tartanak, amikor $n \rightarrow \infty$, rögzített h mellett van $h > 0$ és $|\arg(-\lambda)| < \alpha$, $|\lambda| \neq 0$.

Másként: az $A(\alpha)$ -stabilis módszer abszolút stabilitási tartománya tartalmazza a $W_\alpha = \{h\lambda : |\arg(-h\lambda)| < \alpha, |\lambda| \neq 0\}$ végtelen szögtartományt a komplex $h\lambda$ síkon /ld. 4. ábra/. Adott λ -ra, $(\operatorname{Re} \lambda < 0)$ a $h\lambda$ pont vagy benne van W_α -ban tetszőleges pozitív h értékre, vagy kívül helyezkedik el. Így ha előre tudjuk, hogy a Jacobi mátrix összes sajátértéke egy W_α -szögtartományban helyezkedik el, akkor a feladat megoldására egy $A(\alpha^*)$ -stabilis módszert használhatunk, anélkül, hogy a lépéshosszt stabilitási követelményeknek megfelelően kellene megválasztani.

Az A-stabilitás az $A(\pi/2)$ stabilitásnak feleltethető meg /ezért a harmad- és annál magasabb rendű $A(\alpha)$ -stabilis módszerek esetében a képlethiba minden határon túl növekszik, amikor $\alpha \rightarrow \pi/2$).

A módszer $A(0)$ -stabilis, ha $A(\alpha)$ -stabilis valamilyen elég kicsiny $\alpha \in (0, \pi/2)$.

Az $A(0)$ -stabilis módszerek akkor használhatók, ha a sajátértékek valósak /pl. ha a Jacobi mátrix szimmetrikus/.

A fenti szerző bebizonyította a következő tételt:

- a/ Nem létezik explicit LTL, $A(0)$ -stabilis módszer.
- b/ Az LKL módszerek közül $k+1$ -ed rendű $A(0)$ -stabilis módszer csak a trapéz szabály.
- c/ Minden $\alpha \in [0, \pi/2)$ esetén létezik k -ad rendű k lépéses módszer, amely $A(\alpha)$ -stabilis.

Megjegyezzük, hogy Dahlquist /1956/ tétele értelmében az LTL módszer rendje és a lépések száma közötti összefüggés a következő:

Rögzített k mellett a k -lépéses stabilis módszer rendje legfeljebb $k+1$, ha k páratlan és $k+2$, ha k páros.

Ez a tétel mutatja, hogy egy adott pontosságú stabilis módszer konstruálásához hány paramétertől függő formulát célszerű felvenni. Ha több paramétert választunk, akkor azok felhasználhatók a képlethiba csökkentésére /ld. később 2.3.2./.

Norsett /1969/ elégséges, könnyen ellenőrizhető feltételeket ad meg az $A(\alpha)$ -stabilitásra és néhány konkrét k -lépéses $/k=3,4,5/$ képletre alkalmazva, megkeresi azt a legnagyobb α értéket $(\alpha \in (0, \pi/2))$, amelyre az adott képletek $A(\alpha)$ -stabilisek. A retrográd differenciálási módszerre kapja, hogy

$k=1$	3	4	5
α_{\max}	$88^\circ 27'$	$73^\circ 14'$	$18^\circ 47'$

A módszer általános alakja:

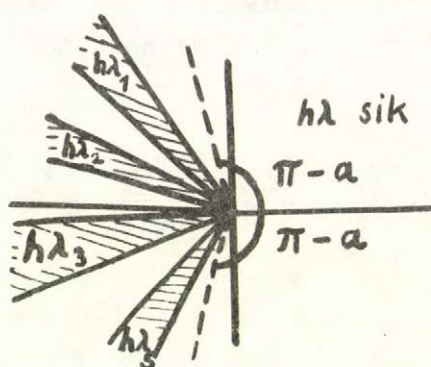
9. algoritmus

$$y_{n+1} = \sum_{j=1}^k \alpha_j y_{n+1-j} + h \beta_0 f_{n+1} \quad (20)$$

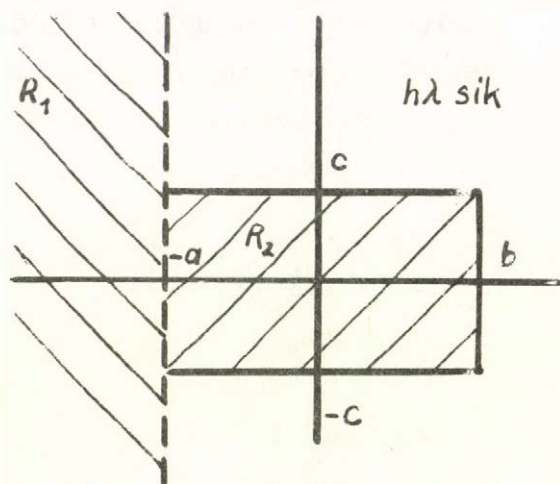
ahol az α_j , β_0 együtthatókat $k \leq 6$ esetén az 1. táblázat adja.

k	2	3	4	5	6
β_0	$\frac{2}{3}$	$\frac{6}{11}$	$\frac{12}{25}$	$\frac{60}{137}$	$\frac{60}{147}$
α_1	$\frac{4}{3}$	$\frac{18}{11}$	$\frac{48}{25}$	$\frac{300}{137}$	$\frac{360}{147}$
α_2	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{9}{11}$	$-\frac{36}{25}$	$-\frac{300}{137}$	$-\frac{450}{147}$
α_3		$\frac{2}{11}$	$\frac{16}{25}$	$\frac{200}{137}$	$\frac{400}{147}$
α_4			$-\frac{3}{25}$	$-\frac{75}{137}$	$-\frac{225}{147}$
α_5				$\frac{12}{137}$	$\frac{72}{147}$
α_6					$-\frac{10}{147}$

1. Táblázat



4. ábra



5. ábra

Egy másfajta fontos stabilitási követelményt Gear /1969/ határozott meg:

Egy numerikus módszer stiff-stabilis ha

- a/ az abszolút stabilitási tartománya tartalmazza az R_1 és R_2 tartományt, valamint
- b/ pontos megoldást ad az összes $h \in R_2$ esetén az $y' = \lambda y$, $y(x_0) = y_0$, $\text{Re}(\lambda) < 0$ tesztegyenletre alkalmazva, ahol $R_1 = \{ h\lambda : \text{Re}(h\lambda) < -a \}$, $R_2 = \{ h\lambda : -a \leq \text{Re}(h\lambda) \leq b, -c \leq \text{Im}(h\lambda) \leq c \}$ és a, b, c pozitív konstansok. A komplex $h\lambda$ sík R_1 és R_2 tartománya az 5. ábrán látható.

A definíciót a következő megoldások motiválták: $e^{h\lambda}$ a megmondások összetevőjének a λ sajátértéknek megfelelő változása egy lépés alatt. Ha $h\lambda = u + iv$, akkor a változás e^u nagyságú. Ha $u < -a < 0$, akkor egy lépés alatt ez a komponens legalább e^{-a} -szorosára redukálódik. Általában nincs szükségünk arra, hogy a nagyon kicsi, gyorsan lecsökkenő /tranziens/ megoldás pontos legyen, így valamilyen a értéktől kezdve elhanyagolhatjuk az R_1 -ben lévő többi komponenst, és elegendő a tagok tetszőleges stabilis reprezentációja. Az origó körül azonban már pontosságot is szeretnénk elérni, ehhez a stabilitás is szükséges. Ha $u > b > 0$,

egy lépésben a megoldás komponensének növekedése legalább e^b . A növekedést korlátoznunk kell, hogy a lépéshossz elég jól kövesse ezt a változást, így soha nem használjuk az $u > b$ tartományt. Ha $|v| > c$, legalább $c/2\pi$ teljes oszcillációs ciklus jut egy lépésre. Az R_1 -en kívül, ahol nem érdekelnek bennünket a megoldás csökkenő összetevői, és az $u > b$ tartományon kívül, amelyet nem használunk, általában követnünk kell ezeket az oszcillációs megoldásokat. /Gyakorlati megfontolások miatt általában $c < \pi/5$ értéket vesznek./

A stiff-stabilis módszerek mindig $A(\alpha)$ -stabilisak, ami fordítva nem igaz.

A stiff-stabilis módszerek létezése az a, b, c paraméterektől és a pontosság definíciójától függ. A pontosságot rendszerint a módszer rendjével határozzák meg. Gear (1969) megmutatta, hogy létezik olyan a, b és c konstans, amelyre a k -lépéses k -ad rendű ($k \leq 6$), (20) retrográd differenciálási képletek stiff-stabilisek és a stabilitási tartományukat is megadta.

Nem ismeretes, hogyan lehet általános esetben stiff-stabilis módszert konstruálni. Cooke (1972) vizsgálta az ilyen algoritmusok tulajdonságait és elégséges feltételeket adott az ilyen osztályba tartozó tipikus módszerek konstruálására a $k=r=2,3$ esetben.

A (20) retrográd differenciálási formulák általánosításával Bickart és Picel (1973) 25-öd rendig bezárólag konstruált stiff-stabil módszereket (ezek a 2.3.3.-ban ismertetendő blokk implicit módszerek osztályába tartoznak).

A formulák egyrésze ugyan nagy stabilitási tartománnyal rendelkezhet, de előfordulhat, hogy a tesztegyenlet $\{y_n\}$ közelítő megoldásaira

$$|y_n/y_{n-1}| \rightarrow 1, \text{ amikor } h\lambda \rightarrow -\infty.$$

E tulajdonság miatt az analitikus megoldás gyorsan zérushoz tartó tranziens összetevői a numerikus megoldásban lassan eltűnő, eset-

leg oszcilláló összetevőként jelentkeznek. Ez korlátozhatja a lépéshosszt, különösen ha több tranziens összetevő is van. Azokat a képleteket, amelyekre ez a tulajdonság nem áll fenn "a végtelenben stabilis"-nak nevezzük.

A közelítő módszer a végtelenben stabilis, ha létezik olyan valós $W > 0$, hogy

$$\sup_{|h\lambda| < W} |y_n / y_{n-1}| = C < 1,$$

ahol $\{y_n\}$ a tesztegyenlet konstans $h > 0$ lépéshosszal előállított közelítő megoldása.*

Gear képletei stabilisek a végtelenben, de a trapézszabály nem. (Ugyanis a trapézszabály esetén:

$$|y_{n+1} / y_n| = \left| (1 + 1/2 h\lambda) / (1 - 1/2 h\lambda) \right| = \left[(1 + h\operatorname{Re}\lambda + 1/4 h^2 |\lambda|^2) / (1 - h\operatorname{Re}\lambda + 1/4 h^2 |\lambda|^2) \right]^{1/2}$$

és ha $h \operatorname{Re}\lambda \rightarrow -\infty$, ez tart a +1-hez).

Enright (1974) konstruált stiff-stabilis és a végtelenben stabilis módszer, amely explicite felhasználja a rendszer Jacobi mátrixát. Az $y' = f(y)$ alakú egyenletrendszerre a következő k -lépéses $(k+2)$ -ed rendű formulákat adta meg:

10. algoritmus

$$y_{n+1} = \sum_{r=1}^k \alpha_r y_{n+1-r} + h \sum_{r=0}^k \beta_r y'_{n+1-r} + h^2 \sum_{r=0}^k \gamma_r y''_{n+1-r} \quad (21)$$

Ha $|\beta_0| + |\gamma_0| \neq 0$, a formula implicit.

A $k \leq 7$ esetben a formulák stiff-stabilisek, ha az együtthatókat a 2. táblázat szerint választjuk meg.

*Mások ezt a tulajdonságot L-stabilitásnak, vagy stiff A-stabilitásnak nevezik (Lambert (1973)), ha az A-stabilitás is szerepel a definícióban.

A módszer implicitisége miatt minden lépésben meg kell oldanunk egy nemlineáris egyenletrendszert. Mint ezt már megjegyeztük, a stiff egyenletek esetében a módosított Newton-Raphson módszer használata célszerű. Az iterációs eljáráshoz szükség van a rendszer $\partial f / \partial y$ Jacobi mátrixára vagy annak egy közelítésére, ezért a (21) közelítő formulában szereplő y'' tag kiszámítása nem okoz többletmunkát (ugyanis $y'' = (\partial f / \partial y) y'$). Megemlítjük, hogy a 2.2.3. szakaszban ismertetett (19) módszer (21)-nek részesete.

Az A-stabilitásnál gyengébb stabilitási feltételek lényege, amint azt láttuk, hogy a stabilitási tartományt csökkentjük az egész negatív $h\lambda$ félsík helyett, valamilyen D tartományra. Az $A(\alpha)$ -stabilis módszerekre $D=W_\alpha$, a stiff stabilis módszerek esetén $D=R_1$.

A különböző, stiff egyenletek megoldásához szükséges stabilitási tulajdonságok algebrai módszerekkel is vizsgálhatók, ekkor a módszer együttthatói segítségével konstruált speciális polinomok gyökeire rónak ki feltételeket (erről ld. pl. Liniger (1974)).

2.3.2. Exponenciálisan illeszkedő többlépéses módszerek

A klasszikus integrálási módszerek előállíthatók abból a követelményből, hogy az $y'=Q(t)$ skalár egyenletre alkalmazva pontosak legyenek, ahol $Q(t)$ tetszőleges s -ed foku polinom. Ekkor a módszer legfeljebb a $p=s+1$ -ed foku polinom alakú y függvényekre lesz pontos.

Módszerek konstruálására egy ekvivalens lehetőség, ha megköveteljük, hogy az $y=e^{a\lambda}$ függvényre alkalmazva (azaz az $y'=\lambda y$ differenciálegyenletre) a lokális képlethiba $O(|h\lambda|^{p+1})$ nagyságrendű legyen, ami ismét ekvivalens azzal, hogy a módszer pontos az $y=Q_p(x) \cdot e^{\lambda x}$ függvényre, ahol Q_p p -ed foku polinom. Az ilyen módszereket a p -ed rendhez exponenciálisan illesztett módszereknek nevezzük a $h\lambda$ sík origó pontjában. Általában a stiff típusú egyenletek esetén az exponenciális illeszkedésre szükség van a $h\lambda$ sík más pontjaiban is. Ezért bevezetik a

következő definíciót:

Egy numerikus módszer exponenciálisan illesztett a p_j rendhez egy komplex $\lambda = \lambda_j$ sajátértékénél, ha a módszert a tesztegyenletre alkalmazva a lokális képlethiba $O((h|\lambda - \lambda_j|)^{p+1})$ nagyságrendű lesz.

Ez a tulajdonság akkor különösen hasznos, ha a tranziens nagy abszolútértékekhez tartozó megoldásokra is elég nagy pontossággal van szükségünk. Az exponenciális illesztés általában véve lehetővé teszi a nem elegendően magas fokszámu polinom illesztés miatti hibák lépésenkénti $e^{-h\lambda}$ arányu csökkenését, azaz a módszer pontosságának növelését.

Ha megfelelő illeszkedési tulajdonsággal rendelkező módszert választottunk ki és a tranziens probléma linearizálható, akkor a tranziens fázisban is viszonylag nagy lépéshosszal számolhatunk.

Liniger/Willoughby (19) módszere esetében a formula szabad paramétereit (a h lépéshossztól különbözőket) úgy választhatják meg, hogy a formulák A -stabilisak és pontosak legyenek a stiff rendszer egy gyorsan változó megoldására (azaz exponenciális illeszkedésűek legyenek). Pl. a formulák exponenciálisan illeszkedhetnek a zérus rendhez a $h\lambda$ komplex síkon a valós tengely negatív részének tetszőleges pontjában. Ha a választott $h\lambda_j$ pont -2 -nél kisebb, akkor a formula stabilitási tartománya a $\text{Re}(h\lambda) < 0$ félsík és a módszer A -stabilis.

2.3.3. Más típusu többlépéses módszerek

Lambert és Sigurdsson (1972) olyan LKL módszereket ajánl, amelyeknek az együtthatói a Jacobi mátrix közelítésétől közvetlenül függenek. Ezek általános alakja:

11. algoritmus

$$\sum_{j=0}^k [\alpha_j^{(0)} E + \sum_{i=1}^r \alpha_j^{(i)} h^i Q_n^i] y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k [\beta_j^{(0)} E +$$

$$\sum_{i=1}^{r-1} \beta_j^{(i)} h^i] Q_n^i f_{n+j} \quad (22)$$

ahol Q_n egy $n \times n$ -es mátrix $Q_n^i = (Q_n^i)^i$, amelynek normája minden n -re korlátos, E az egységmátrix és $\alpha_k^{(0)} + \sum_{j=1}^r \alpha_j^{(i)} h^i Q_n^i$

nem szinguláris. A módszer rendje Q_n -tól nem függ, de gyakorlatban Q_n az adott rendszer negatív előjellel vett Jacobi mátrixa az $x=x_n$ pontban (nem minden integrálási lépésnél számítják ki újra a Jacobi mátrixot). Belátható, hogy a (22) módszerek között vannak $2r$ -ed rendű A-stabilis módszerek is. Az A-stabilitási tulajdonság akkor is megmarad, ha $\beta_k^{(i)} = 0, i=0,1,\dots,r$. Általában az ilyen módszerek már nem nevezhetők explicitnek, mert az y_{n+k} tag együtthatója mátrix, és az y_{n+k} megoldás előállításához azt integrálnunk kell. Így minden integrálási lépésnél egy lineáris egyenletrendszer kell megoldanunk, ezért megfelelő elnevezés a lineárisan implicit módszer lehetne.

Az alábbiakban mutatunk egy példát a (22) módszerosztályból:

$$\begin{aligned} & (E + 2/3 h Q_n + 1/6 h^2 Q_n^2) y_{n+3} - (E + 19/12 h Q_n + 1/2 h^2 Q_n^2) y_{n+2} \\ & + 4/3 h Q_n + 1/2 h^2 Q_n^2 y_{n+1} - (5/12 h Q_n + 1/6 h^2 Q_n^2) y_n \\ & = h \{ (23/12 E + 1/2 h Q_n) f_{n+2} - (4/3 E + 1/2 h Q_n) f_{n+1} \\ & + (5/12 E + 1/6 h Q_n) f_n \} \end{aligned}$$

Ez egy harmadrendű lineárisan implicit módszer, amely A-stabilis lesz, ha a Q mátrix azonos lesz az egyenletrendszer negatív előjellel vett Jacobi mátrixával.

A-stabilis un. progresszív többlépéses módszereket (PTM) konstruál Williams és Hoog (1974) tizedrendűig bezárólag, amelyekhez csak az y' értékeire van szükség és önindítóak. A módszerek felhasználják y' közelítésére $f(x,y)$ olyan értékeit, amelyek x szerint előbbre tartanak, mint a függő változó értékei (innen a progresszív elnevezés).

A PTM módszer alakja:

12. algoritmus

$$y_{nk+r} - y_{nk+r-1} = h \sum_{s=0}^k \beta_{rs} f_{nk+s} ; \quad 1 \leq r \leq k, \quad 0 \leq n \leq N-1, \quad (23)$$

ahol

$$[x_{nk}, x_{nk+k}] \in [x_0, b], \quad k \geq 1 \quad \text{és} \quad b - x_0 = Nkh.$$

Megjegyezzük, hogy a (17) r-blokk implicit egylépéses módszer is tagja az alábbiakban definiált módszerosztálynak.

m egyenletből álló rendszer esetén legyen

$$Y_{n+1} = (y_{nk+1}^T, y_{nk+2}^T, \dots, y_{nk+k}^T)^T,$$

$$F_{n+1} = (f_{nk+1}^T, f_{nk+2}^T, \dots, f_{nk+k}^T)^T, \quad 0 \leq n \leq N-1,$$

T a vektor transzponáltját jelöli. Akkor megfelelően definiált $m_k \times m_k$ dimenziós A, B, C, D blokk mátrixok segítségével a k lépéses PTM felírható a következőképpen:

$$DY_{n+1} - AY_n = h (BF_{n+1} + CF_n),$$

$$\text{ha } Y_0 = (y_0^T, y_0^T, \dots, y_0^T)^T \text{ és } F_0 = (f_0^T, f_0^T, \dots, f_0^T)^T.$$

$k=2$ esetén a módszer explicit alakja az alábbi:

$$y_{2n+1} - y_{2n} = h/12 (5f_{2n} + 8f_{2n+1} - f_{2n+2}),$$

$$y_{2n+2} - y_{2n} = h/3 (f_{2n} + 4f_{2n+1} + f_{2n+2}).$$

A $k \leq 8$ esetre explicit formulák találhatók Rosser (1967) cikkében.

Bár a fenti módszert k -lépéses módszerként említjük, az a számolás szempontjából egylépéses módszerként viselkedik. Az y_{n+1} vektor kiszámításához csak az y_{nk} és f_{nk} értékekre (egy pontban vett értékekre) van szükség.

Igaz az alábbi tétel:

A k - lépéses PTM módszerek A-stabilisek minden $1 \leq k \leq 8$ értékre. A $9 \leq k \leq 20$ esetben a módszer nem A-stabilis.

2.4. Szűrő módszerek

Szűrő módszereknek nevezzük azokat, amelyek valamilyen módon megpróbálják a megoldás gyors (tranzien) összetevőit eliminálni.

E módszerek egyrésze a tranziens összetevőre egy sima közelítő partikuláris megoldást határoz meg, másrészüket a problémát transzformálja úgy, hogy a rendszer Jacobi mátrixának sajátértékei kicsik legyenek.

2.4.1. Szinguláris perturbációk

Ez az elmélet akkor alkalmazható, ha a DE felírható a következőképpen:

$$\begin{aligned} \dot{y} &= g(x, y, z) & y \in \mathbb{R}^{m_y} \\ z' &= f(x, y, z) & z \in \mathbb{R}^{m_z} \\ m_y + m_z &= m \end{aligned} \quad (23)$$

ahol ε egy kicsi, valós paraméter és az y összetevők "stabilisek" olyan értelemben, hogy amikor z rögzítve van tetszőleges x pontban, akkor y összetevők gyorsan elérnek egy egyensúlyi megoldást.

Mac Millan (1968) megfigyelte, hogy az első fázisban (egy határretegben) $x_0 \leq x \leq x_0 + \delta$ az y összetevő nagyon gyorsan változik és az alábbi szinguláris rendszer megoldását közelíti meg:

$$\begin{aligned} 0 &= g(x, y; z) , \\ z' &= f(x, y, z) , \end{aligned}$$

ahol a z -komponensek pedig lassan változnak x szerint. Ha $x \gg x_0 + \delta$, akkor az eredeti probléma megoldása nagyon közeli a szinguláris rendszer megoldásához.

A fenti szerző azt ajánlja, hogy az eredeti problémát integráljuk valamilyen hagyományos módszerrel, amikor $x_0 \leq x \leq x_0 + \delta$.

Az $x > x_0 + \delta$ esetben a lassan változó komponenseket egy explicit hagyományos módszerrel számítsuk ki a lépéshosszt az ezen összetevőkre megkívánt pontosságból határozzuk meg, a gyors összetevőkre pedig az alábbi ε szerinti Taylor-sorfejtést használjuk:

$$y(x, \varepsilon) = y_0(x) + \varepsilon y_1(x) + \dots + \varepsilon^q y_q(x) + O(\varepsilon^{q+1}) .$$

Az $y_j^{(x)}$ értéket differenciálással és a (23) rendszerbe való behelyettesítéssel kapjuk. Minden lépésben meg kell oldanunk q darab lineáris egyenletrendszert és egy nemlineáris egyenletrendszert m_y darab ismeretlennel. Ezenkívül ki kell számolnunk a $q(x, y, z)$ és $f(x, y, z)$ függvények q -ad és annál alacsonyabb rendű, illetve $q-1$ -ed és annál alacsonyabb rendű deriváltjait.

2.4.2. Egy sima partikuláris megoldás előállítása

Dahlquist (1968) és munkatársai konstruálták a következő módszert, amely akkor használható, ha a rendszer Jacobi mátrixának sajátértékei jól szétválaszthatók. Ekkor az y ismeretlen vektort particionálják olyan u és v vektorra, hogy az (1), (2) egyenletrendszerből kapják az alábbi:

$$u' = Au + \Phi(x, u, v), \quad u(x) \in R^{m_u}, \quad (24)$$

$$v' = \Psi(x, u, v), \quad v(x) \in R^{m_v}, \quad m_u + m_v = m; \quad (25)$$

$$u(0) = u_0, \quad v(0) = v_0,$$

ahol A egy szakaszosan konstans, $m_u \times m_u$ dimenziós mátrix, amelynek sajátértékei a baloldali félsíkon helyezkednek el (azaz $\operatorname{Re} \lambda_j < 0$) és a Φ, Ψ sima függvények Lipschitz konstansai sokkal kisebbek, mint az A mátrixnak az x -től független normája. Pontosabban felteszik, hogy

$$\|A^{-1}\| (\|\partial \Psi / \partial v\| + \|\partial \Phi / \partial u\| + 2(\|\partial \Phi / \partial v\| \|\partial \Phi / \partial v\|)^{1/2}) \leq 1 \quad (26)$$

Tegyük fel, hogy m_u egy elég kicsi egész szám, míg m_v lehet nagy is.

Ekkor az eredeti probléma stiffnessége a (24) egyenletrendszerben koncentrálódik, melynek egy sima közelítő partikuláris megoldását egy félig analitikus módszerrel állítják elő.

Ha $\Phi(x, u, v)$ csak x függvénye, $\Phi(x)$, akkor a

$$p(x) = \sum_q A^{q+1} \Phi^{(q)}(x)$$

a (24) rendszer partikuláris megoldását reprezentálja, amelyet az alábbi iterációs eljárás segítségével is meghatározhatunk

$$p_{i+1}(x) = A^{-1} \left(\Phi(x) - \frac{d p_i(x)}{dx} \right),$$

$$p_0(x) = 0.$$

(Ha Φ u -től és v -től is függ, valamint (26) teljesül, akkor ugyanez az iterációs eljárás használható.)

Ha lehetséges a tranziens megoldást linearizálunk, akkor a gyorsan változó u komponensek kiszámítására az un. sima, közeli partikuláris megoldási módszer használható:

$$u_p(x) = (A^{-1} + A^{-2} \frac{d}{dx} + A^{-3} \frac{d^2}{dx^2}) \Phi(x, u_p, v_\Phi)$$

ahol $\partial\Phi/\partial x$ és $\partial^2\Phi/\partial x^2$ értékét véges differenciákkal közelítjük.

A lassu v összetevőket egy hagyományos módszerrel számolják ki pl. a trapéz szabállyal. A módszer a "helyes" partikuláris megoldást állítja elő; azaz u kezdeti értékeit úgy kezeli, hogy hatásuk a v értékekre korrekt módon legyen reprezentálva. Minden lépésben egy $2 \cdot m_u + m_v$ dimenziós egyenletrendszert kell megoldani és az A mátrixra teljesülnie kell a

$\|A^{-1}\| \|\partial\Phi/\partial u\| \ll 1$ feltételnek. Így ezt újra ki kell számítani, ahogy $\partial\Phi/\partial u$ változik, de A viszonylag kis része a Jacobi mátrixnak, ha $m_v > m_u$, így sok munka megtakarítható. A módszer extrapolációval pontosítható. A pontosság egy negyedrendű módszer pontosságával mérhető össze, bár vannak a hiba sorfejtésében zérushoz $O(h^4)$ -nél kevésbé gyorsan tartó tagok, de ezekben az $\|A^{-3}\|$ kis mennyiség szerepel.

3. ALKALMAZÁSI TERÜLETEK

Az alábbiakban bemutatunk néhány konkrét alkalmazási területet, ahol stiff típusu DE-kkel kapcsolatos problémák fordulnak elő. A feladatokat általában a 2. fejezetben leírt módszerek segítségével oldhatjuk meg, mivel a problémák nagyrészt elsőrendű DE rendszer szerepel. Az egyes területek szakfolyóirataiban is számos módszer található, ezekkel azonban nem fogunk foglalkozni.

3.1. Elektromos áramköri és szabályozási problémák

Az elektromos hálózatok és a szabályozás elmélet közös problémája a rendszer válaszának meghatározása zavarás esetében, vagy a rendszer egyik inputjának hirtelen megváltozásakor. Ha a rendszer stiff típusu és fizikai szempontból stabil, akkor a válasz kis időkonstansoknak nagy frekvenciáknak megfelelő komponensei csak a vizsgált intervallum kezdetének közelében jelentősek.

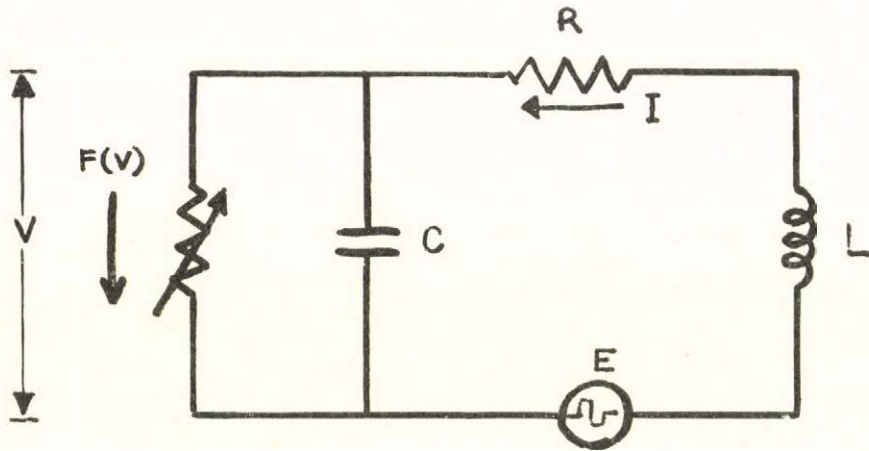
3.1.1. Elektromos áramkörök

Az elektromos hálózatok elméletében a DE stiffnessének problémája gyakran keletkezik olyankor, amikor nagyon kis időkonstansu (nagy frekvenciájú) tranzistorokat vagy más, nemlineáris félvezetőket kapcsolnak össze gyakran lineáris, sokkal nagyobb időkonstansu (kis frekvenciájú) hálózattal.

Példa: Alagut dióda kapcsolási problémája (ld. 6. ábra)
(Axelrod et al. (1962)).

$$L\dot{I} = E - V - R \cdot I, \quad \text{ahol} \quad F(V) = A_3(V^3 - 3A_2V^2 - 3A_1V),$$

$$C\dot{V} = I - F(V), \quad A_i (i=1,2,3), R, E, L \text{ és } C \text{ adott konstansok}$$



6. ábra

Itt a stiffnesset az alagut dióda gyors válaszának megfelelő komponens okozza.

3.1.2. Szabályozási problémák

Ebben az esetben a stiffnesset az elektromos kontroll áramkör kis időkonstansának és valamilyen lassu mechanikus kontroll készülék nagy időkonstansának különbsége okozza. Ha a legnagyobb és legkisebb időkonstans aránya kisebb 10^4 -nél és nincs szükség nagy pontosságra, akkor analóg vagy hibrid számítógépeket használhatunk. (ld. pl. Odén, Rudemo (1970)).

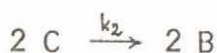
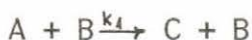
Megemlítjük, hogy léteznek olyan programcsomagrendszerek, amelyek digitális számítógépen szimulálják az analóg vagy hibrid számítógép működését (az MTA SZTAKI CDC 3300-as gépén a MIMIC és ANDISIM programcsomag)

3.2. Kémiai reakciók

3.2.1. Reakciók kvázistacionárius koncentrációju specieszekkel

A polimer és enzim kémiában, valamint a kvantummechanikában gyakran fordulnak elő ilyen típusu reakciók.

Példa: Szénhidrogének folyadékfázisú oxidációja
(Vidóczi T. stb. (1975))



ahol A, B, C a specieszek, k_i a reakciósebesség.

Legyenek rendre $y = \{y_1(t), y_2(t), y_3(t)\}$ az A, B, C specieszek koncentrációi adott t időpontban. Ezeket ismerjük a $t=0$ időpontban. Akkor a modell a következő:

$$y'(t) = A \cdot f(y(t)), \quad y(0) = y_0.$$

$f(y) = \{f_1(y), f_2(y), f_3(y)\}$ a reakciórendszer sebességfüggvényei, $A = \{a_{ij}\}$ a sztöchiometriai együtthatókból képzett

3×3 -as mátrix, $f_j(y) = k_j \prod_{i=1}^3 y_i^{a_{ij}}$ - az elemi reakciók sebességfüggvényei, $j = 1, 2, 3$.

Ha a k_i együtthatók erősen eltérő nagyságrendűek, az egyenlet stiff típusú lesz. (Ez a jelenség jellemzi általában azokat a kémiai rendszereket, amelyekben molekuláris komponensek mellett nagy reakcióképességű gyökök is reagálnak).

k	rend	együttható	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6	β_7
1	3	$-\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$						
2	4	$-\frac{1}{8}$	$\frac{29}{48}$	$\frac{5}{12}$	$-\frac{1}{48}$					
3	5	$-\frac{19}{180}$	$\frac{307}{540}$	$\frac{19}{40}$	$-\frac{1}{20}$	$\frac{7}{1080}$				
4	6	$-\frac{3}{32}$	$\frac{3133}{5760}$	$\frac{47}{90}$	$-\frac{41}{480}$	$\frac{1}{45}$	$-\frac{17}{5760}$			
5	7	$-\frac{863}{10080}$	$\frac{317731}{604800}$	$\frac{2837}{5040}$	$-\frac{1271}{10080}$	$\frac{373}{7560}$	$-\frac{529}{40320}$	$\frac{41}{25200}$		
6	8	$-\frac{275}{3456}$	$\frac{247021}{483840}$	$\frac{12079}{20160}$	$-\frac{13823}{80640}$	$\frac{8131}{90720}$	$-\frac{5771}{161280}$	$\frac{179}{20160}$	$-\frac{731}{725760}$	
7	9	$-\frac{33953}{453600}$	$\frac{1758023}{3528000}$	$\frac{1147051}{1814400}$	$-\frac{133643}{604800}$	$\frac{157513}{1088640}$	$-\frac{2797}{36288}$	$\frac{86791}{3024000}$	$-\frac{35453}{5443200}$	$\frac{8563}{12700800}$

2. Táblázat
A k-lépéses k+2 -ed rendű (21) módszer együtthatói

3.2.2. Desztillációs folyamatok

A desztilláció folyamatát leíró DE rendszer általában nagyon bonyolult és sok egyenletből áll, de a rendszer egyszerű szalagstruktúrájú. Egy erősen leegyszerűsített lineáris modellen mutatjuk be a rendszer szerkezetét és stiffnessének forrását.

Példa: (Rosenbrock 1957)

$$\frac{dy_1}{dt} = -51.1y_1 + 26.2y_2 ,$$

$$\frac{dy_n}{dt} = 24.9 y_{n-1} - 51.1y_n + 26.2y_{n+1}, \quad n = 2, 3, \dots, 49,$$

$$\frac{dy_{50}}{dt} = 24.9 y_{49} - 51.1 y_{50} .$$

A rendszer Jacobi mátrixának sajátértékei közelítőleg -0.1 és -100 között helyezkednek el.

3.3. Reaktor kinetika

A reaktor kinetika a nukleáris reaktorok tranziens viselkedésének modelljeit vizsgálja. Ide tartozik a perturbált hűtőanyag áramlás okozta osszcillációk és a kontroll rud mozgások problémája, a hűtőanyag veszteség következtében fellépő eltérés stb.

A tranziensek élettartama a másodperc tört részétől néhány percig terjedhet.

Példa: Nukleáris reaktor kontroll rud problémája (Willoughby (1974))

$$\begin{aligned} x &= a(y-x) , & x(0) &= 0, \\ y &= (b-d)x - (c-d)y + \alpha t(y+1) , & y(0) &= 0, \end{aligned}$$

$$\text{ahol } 0 < \alpha \ll 1, \quad ab=cd, \quad 0 < d < a \ll b < c \quad (27)$$

A rendszer Jacobi mátrixának sajátértékei a $t=0$ pontban:
 $\lambda = \{-(a-d), -c\}$, ezért a (27) feltételből következik, hogy a rendszer stiff típusú. A $t=T=(c-b)/\alpha$ pontban a Jacobi mátrix szinguláris, és a $t>T$ esetben a reaktor szuperkritikus állapotban van (a megoldás exponenciálisan nő). A vizsgálat célja az volt, hogy megállapítsák, hogy az exponenciális eltérések a megengedett határok között maradnak-e.

3.4. Parciális DE-k

A parciális DE-k és a közönséges DE-k közelítő megoldásának elmélete különböző utakon fejlődött, bár sok közös vonással rendelkezik. A hasonló tulajdonságokat nem mindig azonosan nevezik. Bemutatjuk a parciális és közönséges DE közelítő megoldásának stabilitási tulajdonságai közötti összefüggést a parabolikus egyenlet esetében.

Vizsgáljuk meg a hővezetési egyenletet:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}; \quad \begin{aligned} u(0,t) &= u(1,t) = 0, & t \geq 0 \\ u(x,0) &= f(x), & 0 \leq x \leq 1; \end{aligned} \quad (28)$$

Legyenek Δx és Δt , az x és t tengellyel párhuzamos egyenesekkel definiált rács, rács távolságai. Jelölje u_m^n az $u(m\Delta x, n\Delta t)$ elméleti megoldás véges differencia módszerrel kapott közelítését az $x = m\Delta x$ és $t = n\Delta t$ rácspontban és legyen $r = \Delta t / (\Delta x)^2$. A legegyszerűbb explicit módszer (Самарский (1971) 71.old.) a következő:

$$u_m^{n+1} = (1-2r) u_m^n + r (u_{m+1}^n + u_{m-1}^n) \quad (29)$$

a legegyszerűbb implicit módszer az ún. Crank-Nicholson módszer pedig (ugyanott) :

$$(1+r) U_m^{n+1} - 1/2r(U_{m+1}^{n+1} + U_{m-1}^{n+1}) = (1-r)U_m^n + 1/2r(U_{m+1}^n + U_{m-1}^n) \quad (30)$$

Legyen $x_i = i\Delta x$, $i=0,1,\dots,s$ ahol $s=l/\Delta x$ és $u_i(t)$ jelölje az $u(x_i, t)$ közelítő értékét. Ha a térváltozó szerinti deriváltat pl. centrális differenciával közelítjük, akkor az alábbi lineáris közönséges DE-ket kapjuk

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{1}{\Delta x^2} (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}), \quad i=1,2,\dots,s-1 \quad (31)$$

$$u_i(0) = f(i\Delta x)$$

A (28) parciális egyenlet visszavezetése (31) alakú közönséges DE rendszerre az ún. egyenesek módszere.

Ha a (31) rendszerre alkalmazzuk a (9) Euler módszert Δt lépéshosszal, kapjuk, hogy:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t / (\Delta x)^2 [u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n]$$

$$\text{ahol } u_i^j = u(i\Delta x, j\Delta t).$$

Könnyen látható, hogy ez azonos a (29) formulával. Hasonlóan kapjuk a (30) módszert, ha a (31) rendszerre a (14) trapézszabályt alkalmazzuk.

A (31) rendszer Jacobi mátrixának sajátértékei a következők:

$$\lambda_{s-j} = - \left[\frac{\sin(j\pi\Delta x/2)}{\Delta x / 2} \right]^2, \quad \lambda_1 \approx \frac{-4}{(\Delta x)^2}, \quad \lambda_{s-1} \approx -\pi^2$$

$$j = 2, 3, \dots, s-2.$$

Minél kisebb Δx , az egyenlet annál inkább stiff tulajdonságu lesz. A fenti sajátértékek valósak és a $(-4/(\Delta x)^2, 0)$ intervallumon helyezkednek el.

Mivel az Euler módszer abszolút stabilitási tartománya a valós tengelyt a $[-2, 0]$ szakasz végpontjaiban metszi, a (pozitív) lépéshosszt úgy kell megválasztanunk, hogy $-2 \leq -4\Delta t/(\Delta x)^2 < 0$ legyen, azaz $0 < r \leq 1/2$. Camaporné (1971, 79. old.) megmutatja, hogy a (29) módszer "feltételesen stabilis", ha az r arányra teljesül a fenti feltétel. Hasonlóan, az A- stabilis trapéz módszerrel a (31) rendszer közelítő megoldása tetszőleges pozitív lépéshossz mellett abszolút stabilis lesz. Ennek megfelelően a Crank-Nicholson módszer Szamarszkij szerint abszolút stabil. Megjegyezzük, hogy mivel a (31) rendszer sajátértékei mindig valósak és negatívak, a (28) egyenletre a közelítő módszer abszolút stabilitásához nem szükséges a (31)-et megoldó módszer A-stabilitása; az $A(0)$ -stabilitás is elégséges.

Igy beláttuk, hogy a parabolikus parciális DE-ket megoldó véges differencia módszer stabilitása megfelel az egyenesek módszerével kapott problémát megoldó módszer abszolút stabilitásának, hasonlóan a feltételes stabilitás az $A(0)$ -stabilitással egyezik meg.

• Paraméter becslés (Gear (1971))

A kísérleti kutatásoknál gyakran előfordul, hogy egy $p = \{p^i\}$ paraméterektől függő, DE rendszer vizsgálatára vezetnek. A probléma a következő: különböző időpontokban elvégzett kísérleti mérésekkel meghatározva a megoldás közelítő értékét, keressük a paraméterek értékét. Legyen az egyenletrendszer az alábbi:

$$y' = f(y, t, p), \quad y(0) = y_0(p) \quad (32)$$

és $z_i = y(\tau_i)$ adva van, amikor $i=1, \dots, m$.

Ha éppen annyi τ_i pontban ismerjük az $y(\tau_i)$ értékeket, amennyi egyenletünk és paraméterünk van összesen, akkor egy peremérték

feladatot kell lényegében megoldanunk. Általában több $y(\tau_i)$ érték ismert, mint amennyi a paraméterek és a kezdeti feltételek száma, ekkor a feltételek kielégítésére a legkisebb négyzetekkel való közelítés használható.

Egyes módszerek esetében akkor a $\partial y^i / \partial p^j$ deriváltakra kell az egyenletet megoldanunk.

(32)-ből kapjuk, hogy

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial y}{\partial p} \right) = \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial p} \quad (33)$$

Ha a paraméterek száma q és az y vektornak s darab komponense van, akkor (32) és (33) $(q+1)$ -s egyenletből álló rendszert alkot. Ha az eredeti probléma stiff típusú volt, akkor (33) is stiff típusú lesz, minthogy

$$\frac{\partial \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial y}{\partial p^j} \right) \right]}{\partial \left(\frac{\partial y}{\partial p^j} \right)} = \frac{\partial f}{\partial y},$$

a két rendszer sajátértékei megegyeznek. /Például a kémiai kinetika területén történtek kísérletek paraméter becslési programok konstruálására. (ld. Curtis and Chance (1972))/.

3.6. Differenciál-algebrai egyenletrendszerek /DAE/

Vegyes, algebrai és differenciál egyenletrendszerek megoldására például a nagy hálózatok tranziens analízise során vagy a folytonos rendszer szimulálásánál van szükség. A DAE rendszerek általános alakja

$$w' = f(w, u, t), \quad (34)$$

$$0 = g(w, u, t), \quad (35)$$

ahol az u és v vektor dimenziója megegyezik. Gear (1971/A) vizsgálta a vegyes rendszerek kezdeti érték problémájának közelítő megoldását.

Tipikus eset, amikor a (34), (35) rendszer a következő tulajdonságu:

(34) DE:	(35) algebrai rendszer
nagy, ritka stiff	nagy, ritka, "enyhén nemlineáris"

Ritka olyan értelemben, hogy az f és g függvényben a w és u vektorváltozóknak csak kevés komponense szerepel.

"Enyhén nemlineáris" alatt azt értik, hogy az algebrai változók többsége lineárisan fordul elő és a nemlinearitás a Jacobi mátrixnak kis megváltozását okozza, amikor a függő változók kicsit változnak. Gear az említett cikkben a (34), (35) rendszerek egyidejű megoldására konstruált módszert, amelyben felhasználja a rendszerek "ritkaságát".

4. Számítógépes tapasztalatok

Az MTA CDC 3300-as számítógépen több stiff típusu DE-et oldottunk meg.

4.1. A feladatok

Az egyes feladatokat a következő adatokkal jellemezzük:

$f, x_0, y_0, b, m, \lambda_i, EPS, h_0, h_{max}$

Az első öt paraméter a problémát matematikailag írja le. (ld. (1), (2) feladat jelöléseit).

Az egyenletek száma (m) a számolt esetekben legfeljebb 5.

λ_i az egyenletrendszer Jacobi mátrixának a kezdő ponthoz tartozó sajátértékei jelöli $i=1, \dots, m$.

EPS a lokális hibára pontosabban annak valamilyen normájára kirótt pontossági követelmény, amely esetünkben $10^{-2}, 10^{-4}, 10^{-6}$ volt.



h_0 a kezdeti lépéshossz, amelyet $\frac{1}{|\lambda_{\max}|}$ nagyságrendűnek választottunk, vagy a program választotta így.

h_{\max} a maximális lépéshossz, ennek minden esetben a b értékét választottuk.

A megoldott feladatokból bemutattunk néhány jellegzeteset, amelyek egy része az irodalomból vett tesztfeladat, másik része kinetikai problémából ered. A feladatokat az 1. melléklet tartalmazza.

4.2. A felhasznált programok

Az irodalomban a jelenleg leghatékonyabbnak ismert két módszert alkalmaztuk. Az ezek alapján írt programok megtalálhatók a számítógép NUM-COSY programkönyvtárában.

DIFSU nevű FORTRAN szubrutin (Gear 1971, 1971/B)

A szubrutin a 9. algoritmuson alapuló változó rendű, változó lépéshosszu LKL módszert használja ($1 \leq k \leq 6$) a következőképpen:

k -ad rendű formulával kiszámítja y_{n+1} egy közelítését, y_{n+1}^0 -t:

$$y_{n+1}^0 = \sum_{i=1}^k \alpha_i y_{n+1-i} + \beta_1 h y'_n$$

Aztán pontosítja az így kapott értéket a (20) formulával, amely implicit típusú. Ezért az y_{n+1} értékét módosított Newton módszerrel kapjuk meg, az iterációt az y_{n+1}^0 értékkel indítjuk. Ha az egyenletrendszer lineáris y szerint, akkor az y_{n+1} értékét egy iterációs lépéssel megkapjuk. A nemlineáris esetben több lépésre van szükség. A programban azonban csak akkor számítjuk ki újra a Jacobi mátrixot, ha három lépés után az eljárás nem konvergál.

A módszer rendje és a lépéshossz megválasztása az előírt pontosságtól függ. A program paramétereinek között szerepel az $YMAX(I)$ értékkel egy vektor, amelynek euklideszi normáját hasonlítjuk össze az előírt EPS pontossággal. Egy lépés végrehajtása után az $YMAX(I)$

tömbbe a megoldás I-edik komponensének új maximális értékét helyezi el a program. A felhasználónak minden lépés után lehetősége van az $YMAX(I)$ tömb megváltoztatására, így a lépéshossz választást irányíthatja.

Az eljárás automatikusan indítható, minthogy első híváskor elsőrendű módszert használ.

IMPEX nevű ALGOL programcsomag (Lindberg 1972) *

A program a következőképpen működik:

A kezdőpontban kiszámítja a DE rendszer Lipschitz konstansának közelítő értékét. Ezt használja fel a kezdeti lépéshossz becsléséhez, amelyet a negyedrendű RK módszer használ a tranziens fázisban.

Amikor a tranziens összetevők elhanyagolhatóan kicsik lesznek, megbecsüljük az RK módszerrel kapott közelítő megoldás variációját, hogy a fő programhoz megfelelő kezdeti lépéshosszt választhassunk.

A sima megoldást a 2. algoritmus módosított változatával az un. implicit érintő formulával kapja meg. Az implicit érintő formula a következő:

$$y_{n+1} = y_n + h f((y_{n+1} + y_n) / 2)$$

A pontosság növelése érdekében felhasználja a 2.2.1 szakaszban ismertetett simító eljárást, valamint extrapolációs eljárást is alkalmaz. Az implicit egyenlet megoldására a módosított Newton módszert használja.

A lépéshossz választás úgy történik, hogy a lokális hiba kisebb legyen, mint az általunk előírt globális pontosságból (EPS) kiszámított EPS_{LOK} mennyiség.

* A programkönyvtárban STIFF néven található meg.

4.3. Következtetések

Most a módszerek költségére és megbízhatóságára vonatkozó tapasztalatainkat foglaljuk össze.

A módszer költségét a felhasznált számítási (COMPUTE) idővel, a függvények (jobboldalok) kiszámítását végző eljárások, a rendszer Jacobi mátrixát számoló rutinok, valamint az invertáló eljárások behívásának számával jellemezzük. A számolási eredményeket a 2. melléklet tartalmazza. Az egyes programokkal kapcsolatos tapasztalatok:

DIFSU

A módszer általában hatékonynak és megbízhatónak bizonyult. Ez meggyezik Enright et al (1974) vizsgálatainak eredményével. Azonban a fenti szerzők megállapították, hogy a módszer megbízhatatlan lesz abban az esetben, amikor az egyenletrendszer Jacobi mátrixának sajátértékei közel vannak az imaginárius tengelyhez. Ezt a nehézséget a magasabbrendű formulák szegényes stabilitási tulajdonságai okozzák és a legészrevehetőbb a nagyobb pontosságok esetén, ahol a magasabbrendű formulákat a leggyakrabban használják.

Az imaginárius tengely közelében elhelyezkedő sajátértékek esetén a 12. algoritmust lenne célszerű használni.

A legnagyobb problémát az okozta, hogy ennek a módszernek nagyon érzékeny a lépéshossz kiválasztási stratégiája és ez gyakran jelent nehézséget az eljárás indításában.

A szubrutin nem tudta a (4) kémiai kinetikai probléma megoldását követni, mert a kerekítési hibák miatt egy kis negatív koncentráció lépett fel és a módszer megkísérelte az így keletkezett instabilis megoldást követni. Ha az egyenletek száma ötnél nagyobb, akkor a módszer a mátrix invertálások és a mátrix-vektor szorzások miatt nagyon költséges. Ha ezek helyett LU faktorizációt (trianguláris mátrixok szorzatára bontást) használunk, akkor a számítási idő csökken. Nagy m -ekre a problémán az segít, ha kihasználjuk, hogy a Jacobi mátrix általában ritka.

IMPEX

Általában a módszer megbízhatónak és hatékonynak bizonyult, de használata csak az alacsony pontossági követelmények mellett célszerű. Alkalmazásánál akkor lépnek fel nehézségek, ha a sajátértékek nem különülnek jól el egymástól és erős nemlineáris kapcsolat van a sima és tranziens összetevők között. A módszernek ezt a viselkedését Dahlquist és Lundberg 1973 elméletileg is indokolta meg.

Megjegyezzük, hogy az egyenletrendszer együttthatóinak nagyságrendi eltérése 10^{11} -nél nagyobb, célszerű azt lecsökkenteni változó helyettesítéssel. A CDC gép szimpla pontosságú aritmetikája ugyanis 11 nagyságrendnél nagyobb eltéréssel nem tud számolni a fellépő kerekítési hibák miatt.

A gyakorlat azt mutatja, hogy teljesen hibás eredményeket kapunk, ha stiff egyenletekre kidolgozott módszereket olyan rendszerekre alkalmazunk, amelyek sajátértékei a nagy negatív értéktől vagy pozitív értékig változnak. A kapott közelítő megoldás ugyanis abban az esetben is tovább csökken, amikor a sajátértékek már pozitívek és a DE rendszer pontos megoldása nő. Ennek a jelenségnek magyarázatát Lindberg (1974) adta meg. Így figyelniük kell arra, hogy az ilyen rendszerekre ne alkalmazzuk a stiff módszereket.

Megállapíthatjuk, hogy a gyakorlatban felmerülő feladatok mindegyikére egyformán jól alkalmazható módszer nem létezik. A nehézségeket, problémákat az okozza, hogy a stiffness vázolt jellemzése elsősorban tüneti és nem lényegi. A szokásos tesztegyszerűség a valószínű felmerülő feladatokkal kapcsolatos problémáknak csak egy nagyon leegyszerűsített vizsgálatát teszi lehetővé.

1. Melléklet

A feladatok leírása

1. Lineáris DE rendszer valós sajátértékekkel

Lindberg (1972) tesztfeladata

$$y_1' = -0.1y_1 \quad y_1(0) = 1.0$$

$$y_2' = -y_2 \quad y_2(0) = 1.0$$

$$y_3' = -10y_3 \quad y_3(0) = 1.0$$

Keressük a megoldást a $[0, 20]$ szakaszon.

Sajátértékek : -0.1 , -1.0 , -10.0

2. Lineáris DE rendszerek komplex sajátértékekkel

Lambert (1973) tesztfeladata (ld. 1.2)

$$y_1' = -21y_1 + 19y_2 - 20y_3 \quad y_1(0) = 1.0$$

$$y_2' = 19y_1 - 21y_2 + 20y_3 \quad y_2(0) = 0.0$$

$$y_3' = 40y_1 - 40y_2 - 40y_3 \quad y_3(0) = -1.0$$

Keressük a megoldást a $[0, 2]$ szakaszon.

Sajátértékek : -2 , $-40 + 40i$, $-40 - 40i$

3. Nemlineáris DE rendszer valós sajátértékekkel

Vidóczi (1975) kémiai kinetikai problémája

$$y_1' = -10^4 y_3 y_1 \quad y_1(0) = 0.01$$

$$y_2' = 10^4 y_3 y_1 - 10^7 y_3 y_2 \quad y_2(0) = 0$$

$$y_3' = 7.0 \times 10^{-4} y_3 y_2 - 10^4 y_3 y_1 \quad y_3(0) = 0$$

$$y_4' = -5 \times 10^{-4} y_4 \quad y_4(0) = 0.01$$

Keressük a megoldást a $[0, 2000]$ szakaszon

Sajátértékek : $0, 0, \approx -0.0001, \approx -100$

4. Nemlineáris DE rendszer komplex sajátértékekkel

Datta (1967) kémiai pirolizis

$$y_1' = -7.89 \times 10^{-10} y_1 - 1.1 \times 10^7 y_1 y_3 \quad y_1(0) = 1.76 \times 10^{-3}$$

$$y_2' = 7.89 \times 10^{-10} y_1 - 1.13 \times 10^9 y_2 y_3 \quad y_2(0) = 0$$

$$y_3' = 7.89 \times 10^{-10} y_1 - 1.1 \times 10^7 y_1 y_3 \quad y_3(0) = 0$$

$$+ 1.13 \times 10^3 y_4 - 1.13 \times 10^9 y_2 y_3$$

$$y_4' = 1.1 \times 10^7 y_1 y_3 - 1.13 \times 10^3 y_4 \quad y_4(0) = 0$$

Keressük a megoldást a $[0, 1000]$ szakaszon.

Sajátértékek : $0, -7.5 \times 10^{-10} \pm 9.2 \times 10^{-4}i \Rightarrow 2.9 \times 10^{-4}$

$\pm 8.7 \times 10^{-4}i \Rightarrow -9.4 \times 10^{-5}, -0.019,$

-2.0×10^4

2. Melléklet

A számítógépes futtatások költsége

DIFSU szubrutin

<u>EPS</u>	Feladat száma	Számolási idő/min	Függvény hívások	Jacobi hívások	Invert. hívások
10**-2	1/	0.04	114	8	8
	2/	0.034	108	8	8
	3/	0.02	32	7	7
	4/	0.031	81	26	26
10**-4	1/	0.175	507	9	9
	2/	0.155	528	9	9
	3/	0.027	50	7	7
	4/	-	-	-	-
10**-6	1/	1.36	3637	10	10
	2/	0.45	1512	10	10
	3/	0.105	198	7	7
	4/	-	-	-	-

IMPEX (STIFF) program

<u>EPS</u>	Feladat száma	Számolási idő/min	Függvény hívások	Jacobi hívások	Invert. hívások
10**-2	1/	0.48	161	5	5
	2/	1.21	718	280	280
	3/	0.81	321	96	96
	4/	0.011	3	9	9
10**-4	1/	0.35	331	7	7
	2/	1.5	1146	475	475
	3/	0.7	187	16	16
	4/	0.015	17	11	11

10**6	1/	0.81	804	6	6
	2/	1.8	2327	598	598
	3/	1.4	298	21	21
	4/	0.024	43	16	16

Summary

Many fields of application, notably biology, chemical kinetics, reactor physics, control theory etc., yield initial problems of ordinary differential equations, in which the components of the solution have very different magnitude.

Attempts to use the traditional numerical methods to solve such problems (so called stiff problems) encounter very substantial difficulties (the compute time may increase catastrophally and we can't get a solution of acceptable accuracy).

This survey reviews on theoretical study of this phenomena and contains many methods for the solution of stiff differential equation. At last we present some field of application and give a short summary of the computer experiences related to solution of such problems.

Р е з ю м е

Во многих областях приложения — в биологии, в кинетической химии, в ядерной физике, в планировании вычислительных машин и т.д. — часто встречаются такие дифференциальные уравнения, у которых при решении на больших интервалах компоненты решения имеют очень различный порядок изменения. Если при решении, так называемых жестких систем, применим обычные численные методы, тогда машинное время может катастрофически возрастать и все же не получается решение с удовлетворительной точностью.

В этой работе мы рассматриваем теоретические подходы к этим явлениям и покажем методы для решения таких проблем. Наконец мы представим несколько области применения и дадим короткий отчет об опытах решения таких задач на вычислительной машине CDC 3300.

IRODALOMJEGYZÉK

- [1] Axelrod et al: IBM J. Res. and Dev.6. 1962
- [2] Axelsson O.: A class of A - stable methods BIT 9,1969
- [3] Бахвалов Н.С.: Численные методы, Наука, 1973.
- [4] Bickart T.A. and Z. Picel: High order stiffly stable composite multistep methods for numerical integration of stiff differential equations BIT 13. 1973
- [5] Birkhoff G. and Varga R.S.: Discretization errors for well-set Cauchy problems
Journal Math. and Phys. 44. 1965
- [6] Bjurel G., G. Dahlquist, Lindberg B. et al: Survey of stiff Ordinary Differential Equations Report NA 70. 11
The Royal Institute of Technology Stockholm 1970
- [7] Butcher J.C.: Implicit Runge-Kutta processes
Math. Comp. V.18. 1964
- [8] Collatz R.: Functional Analysis and Numerical Mathematics
New York 1966
- [9] Cooke C.H.: On stiffly stable implicit linear multistep methods
SIAM J. Numer. Anal. Vol.9. No.1. 1972
- [10] Curtis A.R. and Chance E.M.: Numerical methods for Simulation and Optimization ed. Hemker and Hess: Analysis and Simulation of Biochemical Systems North Holland 1972
- [11] Dahlquist G.: Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations
Math. Scand. 4. 1956
- [12] Dahlquist G.: A special problems for linear multistep methods
BIT, 3, 1963

- [13] Dahlquist G.: A numerical method for some ordinary differential equations with large Lipschitz constants
IFIP Congress 1968
- [14] Dahlquist G.: Problems related to the numerical treatment of stiff differential equations
Proceedings of the International Computing Symposium 1973
- [15] Dahlquist G.; and B. Lindberg: On some implicit one-step methods for stiff differential equations TRITANA 73.02
The Royal Institute of Technology Stockholm 1973
- [16] Ehle B.L.: High order A-stable methods for the numerical solution of systems of D.E.
BIT 8, 1968
- [17] Enright W.H.: Second derivative multistep methods for stiff ordinary differential equations SIAM J. Numer. Anal.
Vol. 11. No. 2. 1974
- [18] Enright W.H., T.E. Hull and B. Lindberg: Comparing Numerical Methods for Stiff systems of ODEs Technical Report No. 69,
University of Toronto 1974
- [19] The automatic integration of stiff ordinary differential equations
Information Processing 68. ed. A.J.H. Morell 187-193. 1969
- [20] Gear C.W.: Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations
Prentice-Hall. Inc. Englewood Cliffs,
New-Yersey 1971
- [21] Gear C.W.: The Simultaneous Numerical Solution of Differential -algebraic systems
IEEE Transactions on Circuit Theory 18. N. 1. 1971./A
- [22] Gear C.W.: The automatic integration of ordinary differential equations
Communications of the ACM V.14.N.3. 1971/B
- [23] Haines C.F.: Implicit integration processes with error estimates for the numerical solution of differential equations
Comput.J. 12, 1969

- [24] Henrici P.: Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations
 John Wiley and Sons, 1962
- [25] Kovács Zsolt: Stiff rendszerek numerikus integrálása TÁKI Szemináriumi közlemények 1971
- [26] Lambert J.D.: Computational Methods in Ordinary Differential Equations
 John Wiley and Sons London 1973
- [27] Lambert J.D. and S.T. Sigurdsson: Multistep methods with variable matrix coefficients
 SIAM J. Numer. Anal. 9. 1972
- [28] Lawson J.D.: Generalized Runge-Kutta processes for stable systems with large Lipschitz constants
 SIAM J. Numer. Anal. 4. 1967
- [29] Lindberg B.: On smoothing and extrapolation for the trapezoidal rule
 Report NA 69.08.
 The Royal Inst. of. Techn. Stockholm 1969
- [30] Lindberg B.: IMPEX - a program package for solution of systems of stiff differential equations Report NA 72.50
 The Royal Institute of Technology STOCKHOLM 1972
- [31] Lindberg B.: On a dangerous property of methods for stiff DE's
 BIT 14, 1974
- [32] Liniger W.: Global accuracy and A-stability of one-and two-step integration formulae for stiff ordinary differential equations
 Conference on Num. Sol. of Diff. Eq. Dundee 1969
- [33] Liniger W.: Connections between accuracy and stability properties of linear multistep formulas
 Comm. of the ACM V. 18. N. 1. 1975
- [34] Liniger W. and R. Willoughby: Efficient integration methods for stiff systems of ordinary differential equations
 SIAM J. Numer. Anal. V.7.N.1. 1970

- [35] Mac Millan D.B.: Asymptotic methods for systems of differential equations in which some variables have very short response times
SIAM J. Appl. Math. V.16.N.4. 1968.
- [36] Norsett S.P.: A criterion for $A(\alpha)$ -stability of linear multistep methods
BIT 9. 1969
- [37] Odén L., Rudemo M.: Analog solution of some ordinary differential equations
Research Institute of National Defense of Sweden 1970
- [38] Pontrjagin L.Sz.: Közönséges differenciálegyenletek
Akadémiai Könyvkiadó 1972
- [39] Rosenbrock H.H.: Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations
Comput.J. 5. 1963
- [40] Rosser J.B.: A Runge-Kutta for all seasons
SIAM Rev. V.9. 1967
- [41] Самарский А.А.: Введение в теорию разностных схем,
Наука, 1971.
- [42] Varga László: Közönséges differenciálegyenletek numerikus módszerei
Tankönyvkiadó 1973
- [43] Watts H.A. and L.F. Shampine: A-stable block implicit one-step methods
BIT 12. 1972
- [44] Widlund O.B.: A note on unconditionally stable linear multistep methods
BIT 7, 1967
- [45] Vidoczi Tamás, Rubajlo V.G., Nemes I., Strehó M., stb.:
Kinetikai törvényszerűségek tanulmányozása szénhidrogének
folyadékfázisú oxidációjában nagy konverziók esetén
Magyar Kémiai Folyóirat 81. évfolyam 1975

- [46] Williams J. and Hoog F.: A class of A-stable advanced multi-
step methods
Math. Comp. V.28. N.125. 1974
- [47] Willoughby R.A.: Stiff Differential Systems New York 1974

A TANULMÁNYOK sorozatban eddig megjelentek:

- 1/1973 Pásztor Katalin: Módszerek Boole-függvények minimális vagy nem redundáns, $\{\wedge, \vee, \neg\}$ vagy $\{\text{NOR}\}$ vagy $\{\text{NAND}\}$ bázisbeli, zárójeles vagy zárójel nélküli formuláink előállítására
- 2/1973 Вашкеви Иштван: Расчленение многосвязных промышленных процессов с помощью вычислительных машин
- 3/1973 Ádám György: A számítógépipar helyzete 1972 második felében
- 4/1973 Bányász Csilla: Identification in the Presence of Drift
- 5/1973* Gyürki J.- Laufer J.- Grint M.- Somló J.: Optimalizáló adaptív szerszámgépirányítási rendszerek
- 6/1973 Szelke Erzsébet - Tóth Károly: Felhasználói Kézikönyv (USER MANUAL) a Folytonos Rendszerek Szimulációjára készült ANDISIM programnyelvhez
- 7/1973 Legendi Tamás: A CHANGE nyelv/multiprocesszor
- 8/1973 Klafszky Emil: Geometriai programozás és néhány alkalmazása
- 9/1973 R. Narasimhan: Picture Processing Using Pax
- 10/1973 Dibuz Ágoston - Gáspár János - Várszegi Sándor: MANU - WRAP hátlaphuzalozó. MSI-TESTER integrált áramköröket mérő, TESTOMAT - C logikai hálózatokat vizsgáló berendezések ismertetése
- 11/1973 Matolcsi Tamás: Az optimum-számítás egy új módszeréről
- 12/1973 Makroprocesszorok, programozási nyelvek. Cikkgyűjtemény az NJSzT és SzTAKI közös kiadásában.
Szerkesztette: Legendi Tamás
- 13/1973 Jedlovsky Pál: Új módszer bonyolult retifikáló oszlopok vegyészmérnöki számítására
- 14/1973 Bakó András: MTA kutatóintézeteinek bérszámfejtése számítógéppel
- 15/1973 Ádám György: Kelet-nyugati kapcsolatok a számítógépiparban
- 16/1973 Fidrich Ilona - Uzsoky Miklós: LIDI-72 listakezelő rendszer a Digitális Osztályon, 1972. évi változat
- 17/1974 Gyürki József: Adaptív termelésprogramozó rendszer (APS) termelő műhelyek irányítására

- 18/1974 Pikler Gyula: MINI-számítógépes interaktív alkatrészprogramíró rendszer NC szerszámgépek automatikus programozásához
- 19/1974 Gertler, J.-Sedlak, J.: Software for process control
- 20/1974 Vámos, T.-Vassy, Z.: Industrial pattern Recognition Experiment - A Syntax Aided Approach
- 21/1974 A KGST I.-15-1.: Diszkrét rendszerek automatikus tervezése c. témában 1973. februárban rendezett szeminárium előadásai
- 22/1974 Arató, M.-Benczúr, A.-Krámli, A.-Pergel, J.: Stochastic Processes, Part I.
- 23/1974 Benkó Sándor-Renner Gábor: Erősen telített mágneses körök tervezési módszere
- 24/1974 Kovács György-Franta Lászlóné: Programcsomag elektronikus berendezések hátlaphuzalozásának tervezésére
- 25/1974 Járdán R. Kálmán: Háromfázisú tirisztoros inverterek állandósult tranziens jelenségei és belső impedanciája
- 26/1974 Gergely József: Numerikus módszerek sparse mátrixokra
- 27/1974 Somló János: Analitikus optimalizálás
- 28/1974 Vámos Tibor: Tárgyfelismerési kísérlet nyelvi módszerekkel
- 29/1974 Mórítz Péter: Vegyész-mérnöki számítási módszerek fázis-egyensúlyok és kémiai egyensúlyok vizsgálatára
- 30/1974 Vámos, T.-Vassy, Z.: THE BUDAPEST ROBOT - Pragmatic intelligence -
- 31/1975 Nagy István: Frekvenciásos, középfrekvenciás inverter elmélete
- 32/1975 Singer-Borossay-Koltai: Gázhálózatok optimális irányítása különös tekintettel a Fővárosi Gázművek hálózataira
- 33/1975 Vámos, T.-Vassy, Z.: Limited and Pragmatic Robot Intelligence
- Mérő, L.-Vassy, Z.: A Simplified and Fastened Version of the Hueckel Operator for Finding Optimal Edges in Pictures
- Галло В.: Программа для распознавания геометрических образов, основанная на лингвистическом методе описания и анализа геометрических структур
- 34/1975 Nemes László: Pattern Identification Method for Industrial Robots by Extracting the main Features of Objects

- 35/1975 Garádi János-Krámli András-Ratkó István-Ruda Mihály:
Statisztikai és számítástechnikai módszerek alkalmazása kór-
házi morbiditás vizsgálatokban
- 36/1975 Renner Gábor: Elektromágneses tér számítása nagyhőmérsékletű
anyagban
- 37/1975 Edgardo Felipe: Specification problems of a process control
display
- 38/1975 Hajnal Andrásné: Nemlineáris egyenletrendszerek megoldási
módszerei
- 39/1975* A. Abd. El Sattar: Control of induction motor by Three ...
- 40/1975 Gerhardt Géza: QDT Grafikus interaktív szubrutinok a CDC 3300
- GD'71 grafikus konfigurációra
- 41/1975 Arató M.-Benczur A.-Krámli A.-Pergel J.: Stochastic Processes,
Part II.
- 42/1975 Arató Mátyás: Fejezetek a matematikai statisztikából
számítógépes alkalmazásokkal
- 43/1975 Matavovszky Tibor - dr. Pásztorné Varga Katalin: Prog-
ramrendszer együttes egyszerűsítése vagy minimalizálása
- 44/1975 Bacsó Nándorné: Pneumatikus áramköri hazardok
- 45/1975 Varga András: Ellenpárhuzamos félvezetőpárokkal vezé-
relt aszinkronmotoros hajtások számítási módszerei
- 46/1976 Galántai Aurél: Egylépéses módszerek lokális hibabecs-
lései
- 47/1976 Abaffy József: A feltétel nélküli függvényminimalizá-
lás kvadratikusan befejeződő módszerei

A * -gal jelölt kivételével a sorozat kötetei az Intézet könyv-
tárában megrendelhetők /Budapest, XIII. Victor Hugo u. 18-22./

